

Romuald Kotowski

**METODY OPISU ZJAWISKA
DYSSYPACJI W MECHANICE**



INSTYTUT PODSTAWOWYCH PROBLEMÓW TECHNIKI
POLSKIEJ AKADEMII NAUK
WARSZAWA 2006

ISSN 0208-5658

Redaktor Naczelny:
doc. dr hab. Zbigniew Kotulski

Recenzent:
prof. dr hab. Jan J. Sławianowski

Praca wpłynęła do Redakcji 10 lipca 2006 r.

Praca habilitacyjna

Instytut Podstawowych Problemów Techniki PAN

Nakład: 100 egz. Ark. druk.: 13,5

Oddano do druku we wrześniu 2006 roku

Druk i oprawa: Drukarnia Braci Grodzickich, Piaseczno, ul. Geodetów 47a

Spis treści

Wstęp	7
Rozdział 1. Akustyczne fale powierzchniowe i analog efektu Schocha	21
1.1. Formalizm Stroha	25
1.2. Fale powierzchniowe i odciekające	28
1.3. Fale sprężyste w anizotropowej strukturze warstwa na podłożu	32
1.3.1. Sformułowanie zagadnienia i związku wyjściowe	32
1.3.2. Propagacja fal w ośrodku poprzecznie izotropowym	37
1.3.3. Odbicie ograniczonych wiązek fal akustycznych w ośrodku poprzecznie izotropowym	46
1.4. Niesprężyste odbicie wiązki fal akustycznych od swobodnej granicy kryształu	50
1.4.1. Przemieszczenie wiązki i jej kształt w położeniu oddalonym od powierzchni	56
1.4.2. Pole falowe na powierzchni	60
1.4.3. Ośrodek poprzecznie izotropowy	63
Rozdział 2. Dyssypacja ruchu dyslokacji	67
2.1. Lepkie hamowanie ruchu dyslokacji	68
2.2. Hamowanie ruchu dyslokacji poprzez wiatr fononowy	72
2.3. Pole dystorsji dla dyslokacji prostoliniowej i dla pętli dyslokacji	74
2.4. Hamowanie ruchu dyslokacji prostoliniowej	76
2.5. Hamowanie ruchu okrągłej pętli linii dyslokacji	78
2.6. Anharmoniczność w modelu Murnaghana	82
2.7. Wiatr fononowy w wysokich temperaturach	84
Rozdział 3. Dyfuzja	91
3.1. Procesy Markova	93
3.2. Makroskopowa interpretacja równania Fokkera-Plancka	97

3.3.	Dyfuzja jako ruch Nelsona-Browna	99
3.4.	Analogia z mechaniką kwantową i strukturami dyssypatywnymi	102
3.5.	Wpływ czasu relaksacji na proces dyfuzji	108
3.6.	Wpływ rozkładu defektów punktowych na wartość współczynnika dyfuzji	113
Rozdział 4. Kryterium ewolucji w ciałach o właściwościach elektromagnetycznych		
4.1.	Wprowadzenie w zagadnienie kryterium ewolucji	118
4.2.	Uwzględnienie w kryterium ewolucji oddziaływań elektromagnetycznych	121
4.3.	Oddziaływanie z polem elektromagnetycznym ciała doskonale czarnego	125
4.3.1.	Warunki równowagi dla ciekłych kryształów	129
4.4.	Ciało zanurzone w cieczy dielektrycznej	135
4.4.1.	Warunki równowagi	138
Rozdział 5. Opis wariacyjny termoelektrodynamiki ciekłych kryształów		
5.1.	Zasada wariacyjna	146
5.2.	Ciało mikropolarne i pola zewnętrzne	147
5.3.	Zasada wariacyjna dla ośrodka mikropolarnego oddziałującego z polem elektromagnetycznym i z polem temperatury	150
Rozdział 6. Formalizm Lagrange'a w opisie procesów dyssypatywnych		
6.1.	Klasyfikacja zasad wariacyjnych i formalizm Lagrange'a	170
6.2.	Podejście Morse'a i Feschbacha	175
6.3.	Podejście Djukicia i Vujanovicia	176
6.4.	Podejście Anthony'ego	178
6.4.1.	Przewodnictwo ciepła	179
6.4.2.	Dyfuzja	181
6.5.	Formalizm kanoniczny	185
6.5.1.	Liniowy oscylator	185
6.5.2.	Równanie przewodnictwa ciepła typu Cattaneo	188
6.6.	Lagrangian dla zjawiska termoelektryczności	190
6.6.1.	Lagrangian oddziałujących pól	192
6.6.2.	Równania Eulera-Lagrange'a	193
Zakończenie		197

Dodatek – Definicje i twierdzenie dotyczące wariacji użytych w opisie ośrodków mikropolarnych	199
A. Wariacje funkcji i funkcjonałów	199
A.1. Wariacje pochodnych	199
A.2. Wariacje całek	200
B. Wariacje obiektów bezwładnych i deformacji	201
C. Wariacje prędkości	203
D. Wariacje pól zewnętrznych	203
E. Wariacje lokalne i niezmiennicze względem cechowania	204
F. Wariacja energii	206
Bibliografia	209

Wstęp

Wszystkie żywioły na zmianę wracają do siebie. Cokolwiek ginie w jednym, przechodzi do drugiego, i natura rozważa swe części, aby wskutek zburzenia proporcji świat nie stracił równowagi. Wszystko jest we wszystkim.

Seneka, Myśli

Praca poświęcona jest przedstawieniu metod opisu zjawiska dyssypacji energii (łac. *dissipatio* – rozproszenie, roztrwonienie, marnotrawstwo [1]) w mechanice. Termin *mechanika* należy tu rozumieć w szerszym kontekście niż ma to miejsce w klasycznym kursie fizyki, w którym mechanikę dzieli się na statykę, kinematykę i dynamikę. Dobrym przykładem prezentowanej w tej pracy tematyki objętej pojęciem mechanika jest książka Cz. Rymarza *Mechanika ośrodków ciągłych* [124], gdzie oprócz zagadnień *stricto* mechanicznych, rozważane są również procesy zachodzące pod wpływem pól termicznych i elektromagnetycznych, a więc uwzględnia się zarówno termodynamikę, jak i elektrodynamikę ciał materialnych, czyli tzw. pola sprzężone. W prezentowanej publikacji zebrano rezultaty prac uzyskanych przez autora samodzielnie lub we współpracy z polskimi i z zagranicznymi naukowcami, a opublikowanymi w wielu znaczących krajowych i międzynarodowych czasopismach naukowych i prezentowanych podczas konferencji naukowych w kraju i za granicą.

Dyssypacja energii jest zjawiskiem fizycznym występującym powszechnie we wszystkich niemal procesach obserwowanych w realnym świecie. Zachodzi ona zarówno w skali makro (tu mamy bardzo dużo przykładów), jak i w skali mikro, na poziomie atomów i cząstek elementarnych, gdzie

obserwacja wymaga już wysoce wyspecjalizowanych urządzeń, a interpretacja wyników wyrafinowanych teorii [147]. Dyssypacja rozumiana jest najczęściej jako transport energii od ruchu uporządkowanego do ruchu nieuporządkowanego, czyli jako zamianę energii kinetycznej na ciepło, a więc przejście energii ruchu postępowego i/lub obrotowego ciała jako całości (np. ruch ciężkiego pojazdu po szynach) do ruchu drgającego małych elementów ciała (atomów, cząsteczek, ziaren...), np. ruchu drgających atomów tworzących szyny i koła pojazdu szynowego. Przykładami układów dyssypatywnych są:

- układy ciał stałych, między którymi działają siły tarcia;
- ośrodki lepkie, w których naprężenia zależą od prędkości deformacji;
- obwody elektryczne z oporem omowym, w których drgania prądu elektrycznego zanikają wskutek zamiany energii prądu elektrycznego w ciepło Joule'a.

W warunkach ziemskich układami dyssypatywnymi są w zasadzie wszystkie układy dynamiczne. Ruch układów dyssypatywnych bada się w podejściu klasycznym za pomocą zwykłych równań dynamiki odnoszących się do układów punktów materialnych, ciał stałych lub ośrodków ciągłych, zaliczając do sił działających również siły dyssypatywne (rozpraszające). W lagrangowskim ujęciu zagadnienia ruchu ciał materialnych, po przyjęciu założenia, że prędkości ruchów makroskopowych są dostatecznie małe, by siły dyssypatywne zależały w przybliżeniu liniowo od prędkości, można wprowadzić tak zwaną funkcję dyssypatywną:

$$F = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^s \sum_{k=1}^s a_{ik} \dot{q}_i \dot{q}_k, \quad (1)$$

gdzie q_1, q_2, \dots, q_s – uogólnione współrzędne, \dot{q}_i – uogólnione prędkości, a a_{ik} – współczynniki, które mogą być zależne od współrzędnych q_i . Funkcja F jest zawsze dodatnia, ma wymiar mocy, a jej wartość liczbowa jest równa połowie ubytku energii całkowitej E na jednostkę czasu:

$$F = \frac{1}{2} \left| \frac{dE}{dt} \right|. \quad (2)$$

Funkcja F pozwala zdefiniować siły dyssypatywne

$$Q_i^d = -\frac{\partial F}{\partial \dot{q}_i}, \quad (3)$$

związane z każdą współrzędną q_i . Zapis ten daje nam możliwość sformułowania równań Lagrange'a w następującej postaci:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = Q_i^d, \quad i = 1, 2, \dots, s, \quad (4)$$

gdzie $L(q_i, \dot{q}_i, t)$ jest funkcją Lagrange'a. Funkcję rozproszenia można oczywiście określić w bardzo wielu zagadnieniach fizycznych, na przykład typu małych drgań mechanicznych, elektrycznych i innych. Wspominamy tu o tym podejściu, gdyż jest ono bardzo często stosowane.

Jeśli pojawia się dyssypacja, to mówimy, że zachodzi proces nieodwracalny. Istnieją w przyrodzie procesy, które mimo iż nie zachodzi w nich dyssypacja pracy zewnętrznej, również zaliczamy do procesów nieodwracalnych. Do tej grupy procesów należą np. spontaniczne reakcje chemiczne, niewymuszona dyfuzja, procesy relaksacyjne... Ten typ procesów związany jest z dążeniem układu do osiągnięcia stanu równowagi, a więc związany jest z niestatecznością procesów. Różnica pomiędzy tymi dwoma typami procesów nieodwracalnych nie jest jednak szczególnie istotna. W przypadku dyssypacji pracy tracimy tę część pracy zewnętrznej, której nie potrafimy odzyskać odwracając kierunek przebiegu procesu, natomiast w przypadku procesów niestabilnych tracimy tę pracę, którą układ mógłby oddać, gdyby proces przebiegał w sposób odwracalny. Tak więc zawsze tracimy tę część energii wewnętrznej układu, której nie potrafimy zamienić na pracę użyteczną, czyli na pracę powiększającą makroskopowo użyteczną część energii wewnętrznej.

Pomimo wagi, jaką dyssypacja odgrywa w przyrodzie, prace takie jak Anthony'ego [19], Kosińskiego [73] czy Turskiego [148], stawiające sobie dyssypację za główny cel badań, są raczej sporadyczne. Znacznie częściej można znaleźć prace poświęcone tylko konkretnemu zjawisku o charakterze dyssypatywnym, typu przewodnictwa ciepła czy dyfuzji lub procesom zachodzącym w materiałach o specyficznych właściwościach [118]. Fakt ten spowodowany jest trudnościami zarówno interpretacyjnymi, jak i czysto formalnymi. Niemniej jednak istnieje pewna grupa prac poświęcona poszukiwaniu metodologii pozwalającej na *całościowy* opis zjawisk zachodzących w realnym świecie: zarówno tych dyssypatywnych, jak i bezdyssypatywnych, czyli na takim rozszerzeniu znanych formalizmów dla procesów bezdyssypatywnych, by obejmowały one swym zakresem również

procesy dyssypatywne (Anthony i Knoppe [20], Grmela [58]). Największe nadzieje na realizację tego zamierzenia budzi formalizm wariacyjny. W tym kontekście należy wymienić takich autorów jak K.-H. Anthony [16], [17], F. Bampi i A. Morro [23], D. Djukic i B. Vujanovic [42], [151], P. Glansdorf i I. Prigogine [55], A.N. Kaufman [71], G. Lebon [88], P.M. Morse i H. Feschbach [98], R.M. Santilli [128], [129], S. Sieniutycz [135].

Zarówno samej dyssypacji, jak i procesom dyssypatywnym, poświęcono bardzo dużo prac i nie sposób tu wymienić nawet tylko części z nich. Tematyce tej poświęcano również specjalne kursy międzynarodowe, np. w CISM w Udine (porównaj CISM Courses and Lectures No 262, 1980, np. prace Perzyny [116] i Wilmańskiego [154], czy też CISM Courses and Lectures No 336, 1993, np. praca Muschika [100]) oraz konferencje (patrz np. Workshop *Dissipation in Physical Systems – Unifying Approaches*, Borków, 1995 [80]).

Na szczególną uwagę zasługuje grupa prac poświęconych zagadnieniu odwrotnemu, czyli określeniu warunków, jakie muszą być spełnione, by można było skonstruować dla danego zbioru równań funkcyjna, z którego dałoby się odtworzyć te równania z zasady wariacyjnej. W pierwszej kolejności należy tu wymienić fundamentalne prace R.M. Santilliego [125], [126], [127], [128], [129] oraz F. Bampiego i A. Morro [23]. Inne oryginalne podejście zaproponowali m.in. M. Grmela [58] i A.N. Kaufman [71], wykorzystując uogólnione nawiasy Poissona do budowy dyssypatywnych układów hamiltonowskich. W tym samym duchu, czyli w duchu poszukiwania nowych metod opisu zjawisk dyssypatywnych, utrzymana jest książka S. Sieniutycza [135], dotycząca zjawisk termo-hydromechaniki. Zasady wariacyjne były konstruowane również dla ciał z wewnętrznymi stopniami swobody, czyli dla ciał mikropolarnych, takich np. jak ciekłe kryształy w pracach Kotowskiego i Radzikowskiej [81], [82], [84].

Wśród wielu formalizmów wariacyjnych jeden ma specjalne znaczenie – jest to formalizm Lagrange’a. Podejściu temu poświęcone są liczne prace Anthony’ego i jego uczniów, np. [15], [16], [20], [21], [131]. Pierwszą część formalizmu Lagrange’a stanowi zasada wariacyjna Hamiltona, która pozwala otrzymać równania Eulera-Lagrange’a (równania ruchu lub równania pola) wraz z warunkami brzegowymi, czyli komplet równań w sposób jednoznaczny opisujących badany problem fizyczny. Druga część formalizmu Lagrange’a, dzięki zastosowaniu twierdzenia Noether, pozwa-

la otrzymać związki konstytutywne i prawa zachowania. W formalizmie Lagrange'a można wyróżnić i trzecią część, gdy wykorzystując dodatkowy problem wariacyjny (ale oparty na poprzednim sformułowaniu) można badać warunki stabilności układu.

Tu przedstawiono wyniki poszukiwań autora poczynając od podejścia czysto fenomenologicznego dla ruchu dyslokacji w kryształach, poprzez metody stochastyczne i analogie z mechaniką kwantową (metoda stochastycznego kwantowania) dla dyfuzji atomów w kryształach, formalizm kanoniczny dla oscylatora z tłumieniem, do metod wykorzystujących w różnych podejściach zasady wariacyjne dla zjawisk termo-elektro-magnetycznych w ośrodkach mikropolarnych. Ta ostatnia grupa prac znajduje się w nurcie badawczym zmierzającym do zamknięcia w ramach jednego formalizmu większości (jeśli nie wszystkich) zjawisk fizycznych.

Rozpoczynamy od zjawiska dyssypacji w postaci zmodyfikowanego efektu Schocha, czyli od nielustrzanego odbicia wiązki fali akustycznej padającej na granicę dwu ośrodków. Ma tu miejsce oddziaływanie z falą powierzchniową, polegające na przekazaniu energii od jednych do innych stopni swobody rozpatrywanego układu. Podobny charakter mają wszystkie zjawiska dyssypatywne: następuje nieodwracalny transfer energii, przy czym musi być spełnione prawo zachowania energii. W opisie teoretycznym uzyskuje się to poprzez rozpatrywanie odpowiednio dobranego układu fizycznego. W optyce i akustyce takie nielustrzane odbicie fali jest dobrze znane [34]. Pojawia się ono wtedy, kiedy to ograniczona wiązka falowa, padając pod kątem θ_i zbliżonym do pewnego krytycznego kąta θ_c , ulega „niesprężystemu” odbiciu, czyli ulega przesunięciu wzdłuż powierzchni i równocześnie jej kształt, w porównaniu z kształtem wiązki padającej, ulega zniekształceniu. Fizyczną przyczyną owego efektu jest rezonansowe oddziaływanie wiązki padającej z powierzchnią padania i wzbudzenie nowego niejednorodnego modu. Okazuje się, że dla kątów padania mało różniących się od kąta krytycznego θ_c , faza współczynnika odbicia χ fal płaskich tworzących wiązkę, silnie zależy od tego kąta, a wielkość bocznego przesunięcia wiązki odbitej jest proporcjonalna do $(\partial\chi/\partial\theta_i)|_{\theta_c}$. Zjawisko Schocha możliwe w wielu różnych sytuacjach fizycznych, np. na granicy płyn – ciało stałe, ale również na swobodnej granicy ciała izotropowego z próżnią. Fale odciekające na granicy płyn – ciało stałe są kombinacją własnych modów z obu ośrodków. Z drugiej strony, na swobodnej granicy anizotropowego ciała

stałego z próżnią, istnieją także fale własne typu odciekającego, odprowadzające energię od powierzchni [67], [150]. Omówiono dwa przykłady zjawiska analogicznego do efektu Schocha. W odróżnieniu od klasycznego efektu Schocha w cieczy, gdy składowe powierzchniowe towarzyszące odbiciu i powodujące jego niesymetrię powstają w twardym podłożu i nie niszczą obrazu falowego w cieczy, w rozpatrywanym tu przypadku powierzchniowe mody falowe doprowadzają do istotnego przeorientowania pola falowego w pobliżu powierzchni w porównaniu z kształtem wiązki padającej i z kształtem wiązki odbitej w objętości kryształu. Przeanalizowano problem dla dowolnej anizotropii, a także na przykładzie symetrii heksagonalnej. Rozdział ten został opracowany na podstawie prac [5] i [7]. Kolejne dwa rozdziały dotyczą kolejnych zjawisk dyssypatywnych: hamowania ruchu dyslokacji w kryształach i dyfuzji atomów w ciałach stałych. Dalsze rozdziały poświęcone są pracom zmierzającym do unifikacji opisu zjawisk dyssypatywnych: kryterium ewolucji, zasadom wariacyjnym i w końcu formalizmowi Lagrange'a.

Rozdział drugi poświęcony jest dynamice dyslokacji. Wg powszechnej opinii, to właśnie dyslokacje są odpowiedzialne za plastyczność materiałów. Podczas plastycznej deformacji materiału dyslokacje przemieszczają się i następuje dyssypacja energii wywołana ich oddziaływaniem z drganiami sieci krystalicznej, czyli z gazem fononowym. Omówiono sposób oceniania zmian wielkości tej dyssypacji w zależności od temperatury, demonstrując różne mechanizmy hamowania ruchu dyslokacji na podstawie prac [11] i [14].

W eksperymentach mierzony jest tzw. współczynnik dynamicznego hamowania ruchu dyslokacji B , definiowany jako współczynnik proporcjonalności pomiędzy siłą lepkiego hamowania dyslokacji F a prędkością ruchu dyslokacji v na jednostkę długości linii dyslokacji. Pokazano, że w niskich temperaturach, znacznie niższych od temperatury Debye'a, wiatr fononowy jest szybko „wymrażany”: $B \sim T^5$. Wraz ze wzrostem temperatury funkcja ta staje się liniowa, a więc jej zachowanie zmienia się w sposób istotny. Efekt ten zachodzi już dla temperatur znacznie niższych od temperatury Debye'a. Otrzymane wyniki mogą być zastosowane również do dyslokacji krzywoliniowych, na przykład do pętli dyslokacji, ale tylko w tych przypadkach, kiedy średnia długość fali fononów jest mała w porównaniu z promieniem krzywizny linii dyslokacji R , czyli dla niezbyt niskich

temperatur. Przeprowadzone rozważania pozwalają ocenić, jak wraz ze wzrostem temperatury i odpowiadającą mu rosnącą długością fali fononów λ_{ph} , zmienia się charakter współczynnika hamowania ruchu dyslokacji od zależności danej wzorem (2.46) i prawdziwej dla $\lambda_{ph} \ll R$, aż do bardziej ostrej zależności od temperatury dla $\lambda_{ph} \gg R$, kiedy to fonony reagują na pętlę dyslokacji jak na defekt punktowy. Z drugiej strony, w granicznym przypadku, kiedy promień R pętli jest rzędu wielkości stałej sieci krystalicznej, to wyrażenie na B stosuje się również do oceny wpływu fononów na hamowanie ruchu skupisk defektów punktowych (crowdionów).

W wysokich temperaturach, wzory (2.45) i (2.46) przeszacowują efekt, ponieważ przy ich wyprowadzaniu nie uwzględniono wpływu jądra dyslokacji. W podrozdziale 2.6 pokazano, że w temperaturach, którym odpowiada długość fali fononów porównywalna ze średnicą jądra dyslokacji, uwzględnienie istnienia jądra dyslokacji, nawet w prostym modelu, prowadzi do pewnej renormalizacji wyrażenia podcałkowego we wzorze (2.46). W teorii kontynualnej dyslokacja jest traktowana jako liniowa osobliwość rzędu $1/r$, a więc w tym przybliżeniu pole sprężyste w jądrze dyslokacji jest nieokreślone. Jest oczywiste, że podejście kontynualne nie może być bezpośrednio stosowane do opisu dyskretnej struktury kryształów rzeczywistych, w każdym razie na pewno nie w pobliżu jądra dyslokacji, gdzie ma miejsce relaksacja pola sprężystego. Można natomiast uwzględnić istnienie jądra dyslokacji modelując je poprzez obcięcie w gładki sposób pola sprężystego przy zbliżaniu się do linii dyslokacji [91].

W rozdziale trzecim do opisu dyfuzji w ciele stałym, zjawiska bez wątpienia mającego charakter nieodwracalny, zastosowano metodę stochastycznego kwantowania [53], [106], [107]. W cytowanych pracach podjęto próbę uzasadnienia mechaniki kwantowej w ramach mechaniki statystycznej, a w szczególności zaproponowano interpretację równania Schrödingera poprzez procesy dyfuzyjne. Tu jednak pozostano w obrębie mechaniki klasycznej, a próba interpretacji w ramach rozważanego modelu stałej \hbar jako stałej Plancka prowadzi do wniosku, że temperatura, w jakiej zachodzi dyfuzja, jest dużo wyższa od temperatury topnienia, więc taka interpretacja nie da się uzasadnić fizycznie. Jako model losowego ruchu dyfundujących atomów wybrano proces Markowa zdefiniowany przez równanie Ito. Gęstość prawdopodobieństwa istnienia trajektorii (rozwiązania) równania Ito przecinającej zbiór $\mathcal{P} \subset \mathbb{R}^3$ w chwili t i w punkcie \mathbf{x} spełnia równanie

Fokkera-Plancka. W klasycznym sformułowaniu teorii dyfuzji zakłada się, że zgodnie z relacją Stokesa, siła $\mathbf{F}(\mathbf{x}, t)$ działająca na dyfundujący atom jest proporcjonalna do średniej prędkości $\mathbf{b}(\mathbf{x}, t)$, z jaką atom opuszcza punkt \mathbf{x} . Uogólnienie relacji Stokesa pozwala na opis dyfuzji jako procesu Nelsona-Browna. Jeśli dokona się założenia o potencjalnym charakterze pól prędkości specjalnej (peculiar velocity) $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ i siły zewnętrznej $\mathbf{F}(\mathbf{x}, t)$, to relacja Nelsona-Browna da się zapisać w postaci analogicznej do równania Schrödingera, ale z nieliniowym potencjałem. Pokazano, że prawdopodobieństwo przejścia z jednego położenia międzywęzłowego do następnego zależy od masy dyfundującego atomu. Jest to możliwe jako wynik pewnych efektów kwantowych i może być uwzględnione w obliczeniach współczynnika dyfuzji D [52]. Efekty kwantowe są szczególnie ważne w niskich temperaturach, gdzie już nie stosuje się wzoru Arrheniusa i gdzie zagadnienie parametru \hbar pojawia się ponownie. Przeprowadzono szczegółową dyskusję przypadku stacjonarnego rozkładu materii, którego właściwości wynikają tylko z relacji Nelsona (3.38). Wskazano na możliwość pojawienia się struktur dyssypatywnych Turinga, czyli na istnienie stanów stacjonarnych dyfundującej materii w stanach dalekich od stanów równowagi termodynamicznej. Przedyskutowano również wpływ czasu relaksacji na proces dyfuzji. Rozdział ten podsumowuje prace [144], [145] i [85].

Rozdział czwarty poświęcony jest zaproponowanemu przez Glansdorffa i Prigogine'a [55] kryterium ewolucji, czyli warunkowi, jaki musi być spełniony, by układ zmierzał w kierunku równowagi termodynamicznej. Kryterium to ma różną postać w zależności od rodzaju i liczby pól uwzględnianych w opisie sytuacji fizycznej.

Przedstawione wyniki rozważań są istotnym uogólnieniem prac Muschika i Papenfuss [101] i [115] dotyczących kryterium ewolucji dla ciekłych kryształów. Uogólnienie polega na uwzględnieniu oddziaływania ośrodka mikropolarnego z zewnętrznym polem elektromagnetycznym. Rezultaty tych badań zostały opublikowane w pracach [83] i [121].

Rozpatrzono dwie sytuacje, z dwoma rodzajami warunków brzegowych:

1. ciało zanurzone w próżni i oddziałujące z zewnętrznym polem elektromagnetycznym emitowanym przez ciało doskonale czarne;
2. ciało zanurzone w cieczy dielektrycznej i wrażliwe na działanie zewnętrznego pola elektromagnetycznego.

Punktem startowym były dwa prawa termodynamiki: prawo zachowania energii i drugie prawo termodynamiki w sformułowaniu Eringena [44]. Przyjęto, że siły masowe $\tilde{\mathbf{f}}$ są potencjalne i niezależne od czasu. W przypadku 1. pokazano, że kryterium ewolucji można otrzymać również po osłabieniu założenia Muschika i Papenfuss, którzy założyli, że proces jest bezźródłowy, czyli że $\tilde{h} = 0$, a również i $\tilde{b} = 0$. W naszym podejściu założono, że zachodzi nierówność

$$\int_{\mathcal{G}(t)} \rho (T^* \tilde{b} - \tilde{h}) dV + \oint_{\partial \mathcal{G}(t)} \mathbf{n} \cdot (T^* \mathbf{s} - \mathbf{q}) dA \geq 0, \quad (5)$$

gdzie \tilde{h} – wydajność źródła energii, \tilde{b} – wydajność źródła entropii, ρ – gęstość masy, $\mathcal{G}(t)$ – continuum mikropolarne, T^* – temperatura otoczenia, \mathbf{s} – wpływ entropii poprzez powierzchnię ciała, \mathbf{q} – wektor ciepła (skierowany przeciwnie do wektora strumienia ciepła).

Otrzymane kryterium ewolucji ma postać

$$\frac{d}{dt} L(\mathbf{x}, t) \geq 0, \quad (6)$$

z potencjałem kinetycznym

$$L(\mathbf{x}, t) \doteq \int_{\mathcal{G}'} [\rho (T^* \eta - \epsilon - \tilde{g} - \tilde{\lambda}) - (\mathbf{m}\epsilon - \mathbf{m}\epsilon^*)] dV', \quad (7)$$

Dla ciała zanurzonego w cieczy dielektrycznej zrobiono następujące założenia:

1. otoczenie ośrodka mikropolarnego ma stałą temperaturę T^* ;
2. gęstość strumienia entropii otoczenia ośrodka mikropolarnego jest proporcjonalna do gęstości wektora ciepła $\mathbf{s}^* = \mathbf{q}^*/T^*$;
3. gęstość działających sił mechanicznych jest konserwatywna, a momenty sił mają postać daną przez wyrażenie

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{f}} &= -\nabla \tilde{g}, \quad \tilde{g} = \tilde{g}(\mathbf{x}), \quad \frac{\partial \tilde{g}}{\partial t} = 0, \\ \tilde{\mathbf{I}} &= \frac{d\tilde{\lambda}}{d\boldsymbol{\xi}} \times \boldsymbol{\xi}, \quad \tilde{\lambda} = \tilde{\lambda}(\boldsymbol{\xi}), \end{aligned} \quad (8)$$

gdzie $\boldsymbol{\xi}$ jest polem dyrektorów [45];

4. nie ma źródeł energii i entropii;
5. otoczenie ośrodka mikropolarnego stanowi jednorodna ciecz dielektryczna.

Jeżeli spełnione są powyższe założenia, to kryterium ewolucji jest słuszne nawet dla procesów przebiegających daleko od stanu równowagi, a potencjał kinetyczny $L(\mathbf{x}, t)$ ma postać

$$L(\mathbf{x}, t) \doteq \int_{\mathcal{G}(t)} [\rho(T^* \eta - \epsilon - \mathbf{k} \epsilon - \tilde{g} - \tilde{\lambda}) - \mathbf{M} \epsilon + \mathbf{M} E^* - \pi_0^*] dV, \quad (9)$$

gdzie η – gęstość entropii, ϵ – gęstość energii wewnętrznej, $\mathbf{k} \epsilon$ – gęstość energii kinetycznej ośrodka mikropolarnego, $\mathbf{M} \epsilon$ – gęstość energii „swobodnego” pola elektromagnetycznego, $\mathbf{M} \epsilon^*$ – gęstość energii pola elektromagnetycznego otoczenia, \tilde{g} – potencjał siły masowej $\tilde{\mathbf{f}}$, $\tilde{\lambda}$ – funkcja reprezentująca momenty sił masowych $\tilde{\mathbf{l}}$ poprzez równanie (8), π_0^* – stałe ciśnienie jednorodnej cieczy dielektrycznej w nieobecności pól elektromagnetycznych,

Rozdział piąty poświęcony jest zasadzie wariacyjnej dla ciał mikropolarnych na przykładzie ciekłych kryształów poddanych działaniu pól mechanicznych, termicznych i elektromagnetycznych. Przedstawiona tu teoria na podstawie prac [81], [82], 'domyka' podejście Eringena [44], który opisywał ciekłe kryształy wychodząc z tzw. pierwszych zasad.

Zaproponowana zasada wariacyjna (5.1), (5.2) jest uogólnieniem zasady wariacyjnej Grota [60]. Uogólnienie polega na uwzględnieniu mikrostruktury ośrodka i oddziaływań termodynamicznych.

Wariacja jest bardzo użytecznym matematycznym pojęciem, pozwalającym na zbadanie infinitezymalnego sąsiedztwa dowolnej wielkości. W przeciwieństwie do procesu różniczkowania w zwykłym rachunku różniczkowym, infinitezymalne różnice nie są wywołane przez zachodzącą zmianę zmiennych niezależnych, lecz są nakładane przez nas na zbiór zmiennych jako rodzaj matematycznego doświadczenia [87], podczas którego rozpatruje się zmiany wirtualne. Lagrange wprowadził specjalny symbol δ , aby odróżnić wariację od różniczkowania d . Tu zastosowano cztery definicje wariacji: wariację całkowitą δ , wariację cząstkową ∂ , wariację typu Weissa $\hat{\delta}$ i wariację lokalną $\check{\delta}$. Wzory ważne dla tego rozdziału i dla prezentowanej teorii zgromadzono w Dodatku na stronie 199.

Pokazano, że podstawowe prawa równowagi otrzymane z postulowanej zasady wariacyjnej (5.82), wraz z tymi przez nas założonymi (5.3), (5.4), (4.66) i (5.14), i uzupełnione przez równania konstytutywne, tworzą kompletny układ równań opisujących ciekłe kryształy oddziaływujące z polem elektromagnetycznym, mechanicznym i temperatury. Zaproponowany formalizm pozwala na opis zarówno stanów równowagowych jak i nierównowagowych ciekłych kryształów, a więc również i procesów dyssypatywnych.

Zasada wariacyjna (5.82) dla prostego ośrodka mikropolarnego ma postać uniwersalną i może być stosowana do opisu innych typów ośrodków ciągłych oddziaływujących z polami zewnętrznymi. Ciekłe kryształy zostały wybrane ze względu na ich duże znaczenie praktyczne.

Wśród wielu sformułowanych dotychczas zasad wariacyjnych najwięcej informacji niesie zasada wariacyjna Hamiltona. Stanowi ona pierwszą część formalizmu Lagrange'a. Jak pokażemy poniżej, podejmowane próby włączenia formalizmu Lagrange'a do opisu procesów dyssypatywnych nie są jednak w pełni zadowalające i wymagają dalszych badań. Podejściu temu poświęcone są liczne prace Anthony'ego, np. [15], [16], [20]. Prace te były inspiracją do naszych poszukiwań, przedstawionych tu w rozdziałach dotyczących dyfuzji, kryterium ewolucji i zasady wariacyjnej dla ośrodków mikropolarnych.

W rozdziale szóstym przytoczono kilka przykładów lagrangianów opisujących zjawiska dyssypatywne. Pierwszy zaczerpnięto z monografii Morse'a i Feschbacha [98]. Zaproponowali oni sposób otrzymywania równań opisujących układy dyssypatywne z zasady Hamiltona poprzez zastosowanie zanurzenia Batemana. Ich metoda, pozwalająca na jednakowe traktowanie układów konserwatywnych i dyssypatywnych, polega na równoczesnym rozważaniu wraz z właściwym równaniem jego zwierciadlanego obrazu. W celu przedstawienia tej metody przedyskutowano jednowymiarowy oscylator z tłumieniem

$$m \ddot{x} + R \dot{x} + K x = 0. \quad (10)$$

Inną metodę prowadzącą do otrzymania równań termodynamiki procesów nieodwracalnych za pośrednictwem zasady Hamiltona zaproponowali Djukic i Vujanovic [42], [151]. Założyli oni, że lagrangian zależy nie tylko od zmiennych pola (np. od temperatury bezwzględnej $T = T(t, x)$) i ich pierwszych pochodnych, ale również od pewnego zbioru dowolnych funk-

cji $\Psi_k(t, x, \lambda)$, $k = 1, 2, \dots, N$ o określonych właściwościach. Działanie tej metody pokazano na przykładzie równania przewodnictwa ciepła, dla którego Djukic i Vujanovic [42] zaproponowali następujący lagrangian

$$\mathcal{L} = \frac{k^2(T)}{2}(\partial_x T)^2 - \frac{\Psi(t, \lambda)}{2} \rho(T) c(T) k(T) (\partial_t T)^2. \quad (11)$$

Jak już wspomniano, najbardziej kompleksowe podejście do lagrangeowskiego formalizmu opisu zjawisk dyssypatywnych zaproponował Anthony [15]. Nowym pomysłem wprowadzonym przez Anthony'ego do opisu zjawiska przewodnictwa ciepła jest *pole wzbudzeń termicznych* $\psi(t, x)$ o wartościach zespolonych i takim, że

$$\psi(t, x) \psi(t, x)^* = T(t, x) \geq 0. \quad (12)$$

Zwróćmy uwagę, że temperatura bezwzględna $T(t, x)$ jest od samego początku dodatnio określona, co wcale nie wynika z klasycznego równania przewodnictwa ciepła i nie musi tu być dodatkowo zakładana. Taka reprezentacja wielkości dodatnio określonej jest znana w fizyce i nosi nazwę reprezentacji Borna.

Funkcja $\psi(t, x)$ może być przedstawione w postaci

$$\psi(t, x) = \sqrt{T(t, x)} e^{i\varphi(t, x)}, \quad (13)$$

gdzie faza $\phi(t, x)$ jest pewną nieznaną funkcją. W związku z tym, również wszystkie inne wielkości można teraz przedstawiać albo w reprezentacji (ψ, ψ^*) albo w reprezentacji (T, φ) . Dotyczy to oczywiście i lagrangianu. Metodę Anthony'ego zaprezentowano na przykładzie zjawiska przewodnictwa ciepła i zjawiska dyfuzji.

Kolejny podrozdział poświęcony jest próbie opisu zjawisk dyssypatywnych w ramach formalizmu kanonicznego [79], [78] dla mechaniki punktu materialnego na przykładzie oscylatora z tarciem i dla teorii pola na przykładzie równania przewodnictwa ciepła typu Cattaneo. Otrzymane wyniki ukazują trudności pojawiające się w tego typu podejściu.

Rozdział zamyka próba konstrukcji lagrangianu dla zjawiska termoelektryczności [77]. Zaproponowano trzy warianty lagrangianów opisujących to zjawisko, ale tylko jeden z nich, ze względu na równanie (6.160), opisuje oczekiwany efekt, a mianowicie zjawisko Joule'a-Thomsona. Przypomnijmy, że prąd elektryczny $\mathbf{j}_e = \hat{\sigma} \cdot \mathbf{E}$ przepływając przez przewodnik w którym istnieje gradient temperatury, oprócz ciepła Joule'a $Q_J = \hat{\sigma} \cdot (\mathbf{E} \otimes \mathbf{E})$

powoduje emisję lub absorbcję ciepła Thomsona $Q_{Th} = \xi \mathbf{j}_e \cdot \nabla T$, gdzie ξ – współczynnik Thomsona.

Jeśli podejmuje się próbę opisu zjawisk sprzężonych, to lagrangian powinien składać się z części opisujących każde z tych zjawisk osobno (by nie zniknął w sytuacji nie występowania któregoś z rozważanych zjawisk) i z części sprzęgającej poszczególne zjawiska. W omawianym tu zjawisku termoelektrycznym składa się on z trzech części

$$\mathcal{L}(\psi, \partial\psi, A, \partial A) = \mathcal{L}_{th}(\psi, \partial\psi) + \mathcal{L}_{em}(A, \partial A) + \mathcal{L}_{int}(\psi, \partial A), \quad (14)$$

gdzie A – potencjał pola elektromagnetycznego, $\mathcal{L}_{th}(\psi, \partial\psi)$ – lagrangian zjawiska przewodnictwa temperatury, $\mathcal{L}_{em}(A, \partial A)$ – lagrangian pola elektromagnetycznego, $\mathcal{L}_{int}(\psi, \partial A)$ – lagrangian oddziaływania. Właśnie taką strukturę ma zaproponowany lagrangian w wersji III. W rozdziale tym wykorzystano prace [75], [76], [77], [78], [79], [85].

W używanych w pracy oznaczeniach, indeksy greckie przyjmują wartości 1, 2, 3, 4, a indeksy oznaczane małymi i dużymi literami alfabetu łacińskiego wartości 1, 2, 3. Stosowana jest konwencja sumacyjna Einsteina.

Rozdział 1

Akustyczne fale powierzchniowe i analog efektu Schocha

Zjawiska dynamiczne występujące w przyrodzie mają przeważnie naturę falową. Piszemy przeważnie, gdyż pamiętamy o słynnym sporze Huygensa z Newtonem o naturze światła i o dualizmie korpuskularno-falowym w mechanice kwantowej, gdzie do opisu cząstek używa się funkcji falowej, a w zjawisku foto-elektrycznym fale zachowują się tak, jakby były cząstkami. Fale były przedmiotem rozważań naukowych już od bardzo dawna. Charakterystyczny jest tu opis pochodzący z VI wieku¹:

Teraz powinniśmy zastanowić się, w jaki sposób słyszymy. Z dźwiękiem zachodzi to samo zjawisko, co z kamieniem zrzuconym z wysoka do wzburzonej albo do spokojnej wody. Najpierw powstaje fala kolista o bardzo małym promieniu, a następnie pojawiają się coraz większe koła, aż do momentu, gdy ruch zmęczony roprowadzaniem fal, zamiera. Kolejna, szersza fala jest zawsze pokryta drobniejszymi wzbudzeniami. Teraz, jeśli cokolwiek zatrzyma rozprzestrzeniające się fale, to natychmiast pojawia się identyczny ruch, pojawiają się nowe koła zafalowań, tak jak w środku skąd rozpoczęło się to wszystko.

W ten sam sposób, gdy powietrze jest uderzone, tworzy się dźwięk, wpływając na inne powietrze w sąsiedztwie i w ten sposób wprawiona zostaje w ruch kolista fala powietrza; i tak się ona rozprzestrzenia docierając do słuchaczy stojących wokół w tym samym czasie. Dźwięk jest bardziej delikatny, gdy osoby znajdują się w pewnym oddaleniu, gdyż fala jaka do nich dociera jest słabsza.

*Anicius Manlius Severinus Boethius
De institutione musica, 500 A.D.*

Olbrzymia różnorodność zjawisk falowych wzbudzała i wzbudza w dalszym

¹ Za: I. Malecki, *Teoria fal i układów akustycznych* [94].

ciągu duże zainteresowanie badaczy, co zaowocowało ogromną liczbą publikacji. Wymieńmy tu tylko jako przykład niektóre podręczniki i serie wydawnicze: F.I. Fedorov, *Theory of elastic waves in crystals* [50]; M.J.P. Musgrave, *Crystal acoustics*, 1970 [103]; *Drgania i fale* pod red. S. Kaliskigo, Komitet Mechaniki PAN, *Mechanika Techniczna III* (1986) [70]; I.A. Victorov, *Poverhnostnye zvukovye volny v tviordih telah* [150]; Z. Wesołowski, *Akustyka ciała sprężystego*, 1989 [153].

Jak widać z zamieszczonego powyżej cytatu, najłatwiejsze do obserwacji były fale powierzchniowe i znane są zapewne najdłużej.

Fale powierzchniowe, zgodnie ze swą nazwą, powstają zawsze na granicy dwu ośrodków, np. na granicy cieczy i gazu, ale również na granicy ciała z próżnią (poniżej damy ich opis bardziej szczegółowo). Z fal powierzchniowych najbardziej znane są fale na powierzchni wód (fale morskie, fale na jeziorze) wywołane działaniem wiatru i siły grawitacji².

Bardziej dogłębnej matematycznej analizy fale powierzchniowe doczekały się dopiero w ostatnim stuleciu, kiedy to zidentyfikowano różne ich rodzaje.

² Stwierdzono, że nawet w przypadku bardzo dużych fal o wysokości powyżej 30 m, głębokie wody zachowują się spokojnie. Na powierzchni falującej krople cieczy poruszają się po torach eliptycznych, więc fale powierzchniowe posiadają zarówno mody podłużne jak i poprzeczne. Prędkość fazowa fal v na wodach głębokich dana jest wzorem

$$v = \sqrt{\frac{2\pi T}{\lambda \varrho} + \frac{\lambda g}{2\pi}},$$

gdzie T – napięcie powierzchniowe, ϱ – gęstość cieczy, λ – długość fali, g – przyspieszenie ziemskie. Prędkość v osiąga wartość minimalną, gdy wpływ grawitacji równoważy wpływ napięcia powierzchniowego, czyli gdy długość fali dana jest wzorem

$$\lambda = 2\pi \sqrt{\frac{T}{g \varrho}},$$

co w przypadku wody daje $\lambda \sim 1,7$ cm. Wszystkie pozostałe fale, zarówno dłuższe jak i krótsze, są szybsze. Dla fal w płytkiej wodzie należy uwzględnić dodatkowo tarcie wody o dno, bo wtedy fala w kierunku malejącej głębokości porusza się z mniejszą prędkością, co powoduje jej spiętrzenie przy brzegu. Fale, w których na wielkość prędkości wpływa w przeważającym stopniu napięcie powierzchniowe, nazywamy falami kapilarnymi, a fale, gdzie większą rolę odgrywa siła grawitacji, nazywamy falami grawitacyjnymi. Innym bardzo ciekawym, ale i groźnym typem fal są fale geofizyczne, powstające wskutek ruchów tektonicznych skorupy ziemskiej (np. fale typu tsunami).

Należy tu wymienić powierzchniowe fale Lamba, Gulyaewa, Stonely'a , Rayleigha, Love'a [27], [149].

Mimo tylu lat badań, fale powierzchniowe również dziś są przedmiotem dużego zainteresowania badaczy teoretyków i praktyków, ze względu na przeogromne bogactwo swych form, a często i na całkiem nietrywialne zachowanie, włączając w to osobliwości parametrów falowych i wzajemne związki rezonansowe fal parcjalnych. Na przykład, w rozpatrywanym poniżej układzie warstwa na podłożu, w zależności od długości fali i stosunku stałych materiałowych, możliwe jest równoczesne i niemal niezależne istnienie fal Rayleigha, Lamba, Stonely'a i Love'a, a również fal odciekających, które ze swej strony generują specyficzne odbicia rezonansowe [8].

W optyce i akustyce dobrze znane jest zjawisko tzw. nielustrzanego odbicia [34], kiedy to ograniczona wiązka falowa, padając pod kątem θ_i , zbliżonym do pewnego krytycznego kąta θ_c , ulega „niesprężystemu” odbiciu, czyli ulega przesunięciu wzdłuż powierzchni i równocześnie jej kształt, w porównaniu z kształtem wiązki padającej, ulega zniekształceniu. Fizyczną przyczyną owego efektu jest rezonansowe oddziaływanie wiązki padającej z powierzchnią padania i wzbudzenie nowego niejednorodnego modu. Okazuje się, że dla kątów padania mało różniących się od kąta krytycznego θ_c , faza współczynnika odbicia χ fal płaskich tworzących wiązkę silnie zależy od tego kąta, a wielkość bocznego przesunięcia wiązki odbitej jest proporcjonalna do $(\partial\chi/\partial\theta_i)|_{\theta_c}$.

W roku 1950 A. Schoch [130] jako pierwszy zaobserwował takie nielustrzane odbicie wiązki fali akustycznej padającej z cieczy na granicę z ciałem stałym i towarzyszące mu wzbudzenie fali odciekającej ze strumieniem energii skierowanym w głąb cieczy. Od tego czasu nazwa tego efektu związana jest z jego nazwiskiem. Dalsza, bardziej szczegółowa analiza zjawiska Schocha została podjęta m.in. w pracach Bertoniiego i Tamira [30] oraz Potta i Harrisa [117]. Inne warianty odbicia akustycznych wiązek w cieczy na twardym podłożu były rozpatrywane na przykład w pracach [105], [108], [109] i [110]. Analogiczne zjawisko występuje również w przypadku fal elektromagnetycznych [68], [69] i w ośrodkach wrażliwych elektromagnetycznie, np. w piezoelektrykach. Na przykład Bahturin w pracy [22] przeanalizował zjawisko przekształcania się objętościowej fali akustycznej w falę Gulyaewa-Blusteina w układzie dwu piezoelektryków oddzielonych

szczeliną. Bahturin przeanalizował również prawo zachowania energii w związku z pojawieniem się fali odciekającej i zmianą kształtu fali odbitej. Wraz z rozwojem nowych technologii, coraz szersze zastosowania znajdują powierzchniowe fale akustyczne w elektronice i w defektoskopii, a w szczególności również zjawisko Schocha [2]. Prace eksperymentalne prowadzone były również w IPPT PAN przez A. Brokowskiego [36].

Zjawisko Schocha możliwe jest nie tylko w cieczy. Na przykład, w pracy [86] pokazano, że przemieszczenie wiązki odbitej pojawia się również przy odbiciu na swobodnej granicy ciała izotropowego z próżnią dla takich kątów padania, którym odpowiada wzbudzenie własnych niejednorodnych fal powierzchniowych (w ciałach izotropowych fale typu odciekającego nie istnieją). Jednakże w tym przypadku przemieszczenie jest rzędu długości fali λ , a więc zdecydowanie mniejsze od przemieszczenia Schocha, które zazwyczaj jest rzędu połowy szerokości wiązki $w \gg \lambda$.

Fale odciekające na granicy ciecz – ciało stałe są kombinacją własnych modów z obu ośrodków. Z drugiej strony, na swobodnej granicy anizotropowego ciała stałego z próżnią, istnieją także fale własne typu odciekającego, odprowadzające energię od powierzchni [67], [150]. Poniżej przytoczymy dwa przykłady zjawiska analogicznego do efektu Schocha. Efekt pojawia się w ciele stałym przy zbliżeniu się kąta odbicia wiązki do kierunku propagacji energii we własnym modzie odciekającym. W odróżnieniu od klasycznego efektu Schocha w cieczy, gdy składowe powierzchniowe towarzyszące odbiciu i powodujące jego niesymetrię powstają w twardym podłożu i nie niszczą obrazu falowego w cieczy, w rozpatrywanym przypadku powierzchniowe mody falowe doprowadzają do istotnego przeorientowania pola falowego w pobliżu powierzchni w porównaniu z kształtem wiązki padającej i z kształtem wiązki odbitej w objętości kryształu. Przeanalizujemy problem dla dowolnej anizotropii, a także na przykładzie symetrii heksagonalnej.

W roku 1962 A.N. Stroh [139] pokazał, wykorzystując formalizm wprowadzony przez Guerneya [61], że w kryształach fale powierzchniowe mogą propagować się we wszystkich kierunkach. W kolejnych latach teoria fal powierzchniowych została rozwinięta bardziej szczegółowo, ze specjalnym uwzględnieniem fal w anizotropowych ośrodkach półnieskończonych (np. [26], [67], [92], [95]). Na szczególne podkreślenie zasługuje fakt, że dowiedziono istnienia i jednoznaczności rozwiązań dla fal powierzchniowych i

ustalono warunki, dla których te twierdzenia zachodzą. Naruszenie tych warunków ma miejsce tylko dla ściśle określonych kierunków propagacji. Istnieją dokładne procedury uzyskiwania wartości parametrów propagacji fal powierzchniowych dla dowolnych kierunków, są one na ogół jednak bardzo skomplikowane. W praktyce, do obliczeń wykorzystuje się techniki numeryczne lub przeprowadza się rachunki dla kryształów o określonej symetrii (porównaj [12]).

1.1. Formalizm Stroha

W dalszych rozważaniach będziemy intensywnie stosowali formalizm Stroha, zwany tak w literaturze dzięki jego pracy [139] z roku 1962. Stroh ograniczył się do stacjonarnych zagadnień dwuwymiarowych (niezależnych od x_3), ale ten fakt nie ogranicza ogólności pomysłu. Formalizm Guerneya - Stroha znajduje wiele interesujących zastosowań, na przykład Ting w swej książce [142] zastosował go do statycznych zagadnień teorii sprężystości. Równanie ruchu w anizotropowej teorii sprężystości w przypadku braku sił objętościowych ma postać

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}, \quad (1.1)$$

gdzie ρ – gęstość masy, u_i – pole przemieszczeń, σ_{ij} – pole naprężeń. Jeśli założymy, że źródło naprężeń porusza się z prędkością v w kierunku x_1 , to

$$u_i = u_i(x_1 - vt, x_2), \quad \sigma_{ij} = \sigma_{ij}(x_1 - vt, x_2). \quad (1.2)$$

W materiałach sprężystych naprężenia są związane z odkształceniami poprzez równanie konstytutywne (prawo Hooke'a)

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial x_l}, \quad (1.3)$$

gdzie c_{ijkl} – tensor modułów sprężystości, posiadający znane symetrie

$$c_{ijkl} = c_{jikl} = c_{ijlk} = c_{klij}. \quad (1.4)$$

Podstawiając (1.3) do równania (1.1) otrzymujemy

$$c_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_l} = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}. \quad (1.5)$$

Założmy teraz następującą specjalną postać związku (1.2)

$$u_i = A_i f(x_1 + p x_2 - v t). \quad (1.6)$$

Pojawia się tu nowa stała, amplituda A_i , którą wyznaczamy z warunku otrzymanego po wstawieniu równania (1.6) do (1.5)

$$(c_{i1k1} - \rho v^2 \delta_{ik} + p c_{i1k2} + p c_{i2k1} + p^2 c_{i2k2}) A_k = 0. \quad (1.7)$$

Ten układ równań może generować niezerowe wartości A_i jeśli wyznacznik macierzy współczynników jest równy zeru. Warunek ten prowadzi do równania szóstego rzędu ze względu na p

$$\|c_{i1k1} - \rho v^2 \delta_{ik} + p c_{i1k2} + p c_{i2k1} + p^2 c_{i2k2}\| = 0. \quad (1.8)$$

Bardzo istotny jest tu sposób numeracji pierwiastków tego równania. Stroh proponuje, by zastosować numerację p_α , gdzie $\alpha = \pm 1, \pm 2, \pm 3$, przy czym w sytuacji gdy pierwiastki są zespolone, to p_α i $p_{-\alpha}$ są wzajemnie sprzężone³, a dodatnie wartości indeksu α odpowiadają wartościom własnym z częścią urojoną większą od zera.

Równania (1.1) i (1.2) dają się zapisać w postaci

$$\frac{\partial}{\partial x_1}(\sigma_{i1} + \rho \dot{u}_i v) + \frac{\partial \sigma_{i2}}{\partial x_2} = 0. \quad (1.9)$$

W dalszym ciągu jako podstawowe zmienne wybierane są funkcje u_i i φ_i , gdzie z definicji

$$\sigma_{i1} = -\frac{\partial \varphi_i}{\partial x_2} - \rho \dot{u}_i v, \quad \sigma_{i2} = \frac{\partial \varphi_i}{\partial x_1}. \quad (1.10)$$

Zauważmy, że φ_1 i φ_2 nie są niezależne, gdyż

$$\frac{\partial \varphi_1}{\partial x_1} = \sigma_{12} = -\frac{\partial \varphi_2}{\partial x_2} + \rho v^2 \frac{\partial u_2}{\partial x_1}. \quad (1.11)$$

Jeśli wprowadzimy oznaczenie $z_\alpha = x_1 + p_\alpha x_2 - v t$ i założymy, że wszystkie p_α są różne, to ogólne wyrażenia na przemieszczenia przyjmuje postać

$$u_i = \sum_{\alpha=\pm 1}^{\pm 3} A_{i\alpha} f_\alpha(z_\alpha), \quad (1.12)$$

³ W dalszej części będziemy stosowali również nieco inną numerację: $\alpha = 1, \dots, 6$, przy czym sprzężone będą pierwiastki p_k i p_{k+3} , $k = 1, 2, 3$.

a z równań (1.10), (1.3) i (1.12) dostajemy

$$\varphi_i = \sum_{\alpha=\pm 1}^{\pm 3} L_{i\alpha} f_\alpha(z_\alpha), \quad (1.13)$$

gdzie

$$\begin{aligned} L_{i\alpha} &= (c_{i2k1} + p_\alpha c_{i2k2}) A_{k\alpha} \\ &= -p_\alpha^{-1} (c_{i1k1} - \rho v^2 \delta_{ik} + p_\alpha c_{i1k2}) A_{k\alpha}. \end{aligned} \quad (1.14)$$

Równania (1.12) i (1.13) są oczywiście prawdziwe dla wszystkich wartości prędkości v , zarówno tych mniejszych jak i większych od prędkości fal sprężystych, ale charakter rozwiązania będzie zależeć od tego, czy wartości p_α są rzeczywiste czy urojone. Eshelby, Read i Shockley [49] pokazali, że dla $v = 0$ wszystkie p_α są zespolone, a z kolei można też pokazać, że dla wystarczająco dużych v wszystkie pierwiastki są rzeczywiste. Widać więc, że istnieją trzy progowe wartości v , (oznaczymy je V_α , $\alpha = 1, 2, 3$), dla których następuje zmiana p_α z liczby zespolonej na rzeczywistą. Niech

$$V_1 \geq V_2 \geq V_3 > 0. \quad (1.15)$$

Mamy tu następujące interesujące przypadki:

- ruch poddźwiękowy (subsonic), gdy $v < V_3$: wszystkie pierwiastki są zespolone, a pole naprężeń można traktować jako quasistatyczne;
 - ruch naddźwiękowy (supersonic), gdy $v > V_3$: co najmniej dwa pierwiastki $p_{\pm 3}$ są rzeczywiste, ruchowi towarzyszy generacja nowych fal.
- Dla każdej z progowych wartości V_α co najmniej dwa pierwiastki $p_{\pm\alpha}$ są sobie równe, a wtedy wielkości u_i i φ_i wymagają specjalnego potraktowania.

Kluczowym elementem formalizmu Stroha jest połączenie dwu wzorów (1.12) i (1.13) w jeden

$$\begin{bmatrix} u_i \\ \varphi_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{i\alpha} \\ L_{i\alpha} \end{bmatrix} \cdot f_\alpha(z_\alpha), \quad (1.16)$$

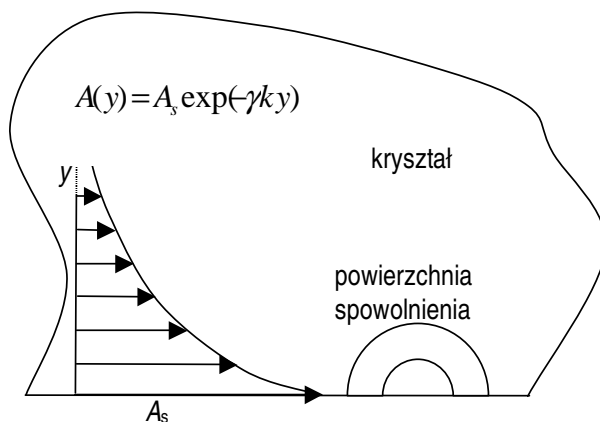
i określenie właściwości macierzy $\begin{bmatrix} A_{i\alpha} \\ L_{i\alpha} \end{bmatrix}$. Zastosowanie tej techniki do fal powierzchniowych zostanie omówione w kolejnych podrozdziałach.

1.2. Fale powierzchniowe i odciekające

Podstawowym obiektem w badaniu zjawisk dynamicznych w ciałach materialnych są fale płaskie. Z fal płaskich można łatwo konstruować paczki falowe, wiązki falowe itp. Jeśli rozważane ciało jest ograniczone, to propagujące się w nim fale dzielimy na fale objętościowe i powierzchniowe. Przez falę powierzchniową rozumiemy spełniającą określone warunki brzegowe falę własną, transportującą strumień energii równoległe do powierzchni i zlokalizowaną w jej pobliżu i o amplitudzie A zanikającej wykładniczo wraz z oddalaniem się od powierzchni. Pole falowe fali powierzchniowej może być utworzone poprzez zsumowanie kilku fal parcjalnych, numerowanych indeksem α , typu

$$A_\alpha(y) = A_{s\alpha} \exp(-\gamma_\alpha k y), \quad (1.17)$$

gdzie k – długość rzutu wektora falowego na powierzchnię, γ_α – stała bezwymiarowa rzędu jedności. Są to typowe cechy sprężystych fal Rayleigha lub akustoelektrycznych fal Bleusteina-Gulyaeva w piezoelektrykach z metalizowanymi powierzchniami (patrz rys. 1.1).



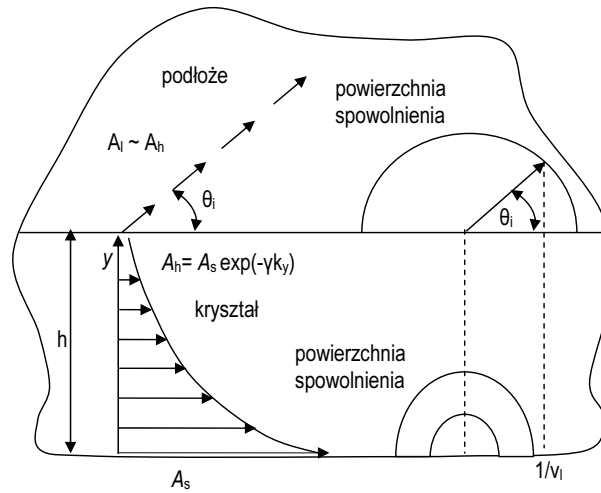
Rys. 1.1. Schemat propagacji fali powierzchniowej w ośrodku półnieskończonym

Jeśli pole falowe na granicy kryształu jest wykładniczo małe, czyli jest typu $A(h) \sim A_s \exp(-\gamma k h)$, ($\gamma = \min \gamma_\alpha$), to w podłożu wytwarza ono pole falowe o amplitudzie tego samego rzędu. Jeśli teraz tak dobierzemy

materiał podłoża, aby prędkość fazowa fali powierzchniowej v_s w warstwie należała do obszaru fal objętościowych w podłożu (rys. 1.2), to towarzysząca fala w podłożu będzie modem objętościowym o małej amplitudzie $A_i \sim A_s \exp(-\gamma kh)$ propagującym się od powierzchni w głąb podłoża. Dla otwartych warunków brzegowych na złączeniu kryształ – próżnia, które jest typowe dla polarytonów powierzchniowych i dla akustoelektrycznych fal powierzchniowych w piezoelektrykach z niemetalizowaną powierzchnią, analogiczne rozważania prowadzą do identycznego obrazu fizycznego. W obu przypadkach występuje mały wyciek energii od fali powierzchniowej do podłoża, co powoduje odpowiednie zmniejszenie amplitudy A_s wzdłuż powierzchni – pojawiła się fala odciekająca. Matematycznie takie zjawisko opisuje się dodając do prędkości fazowej fali odciekającej v_l małą część urojoną

$$v_s \rightarrow v_l - iv_l', \quad v_l' > 0, \quad (1.18)$$

gdzie $v_l' \propto |A_l|^2 \propto \exp(-2\gamma kh)$. Można pokazać, że to samo oszacowanie jest prawdziwe i dla $\Delta v = |v_l - v_s|$.



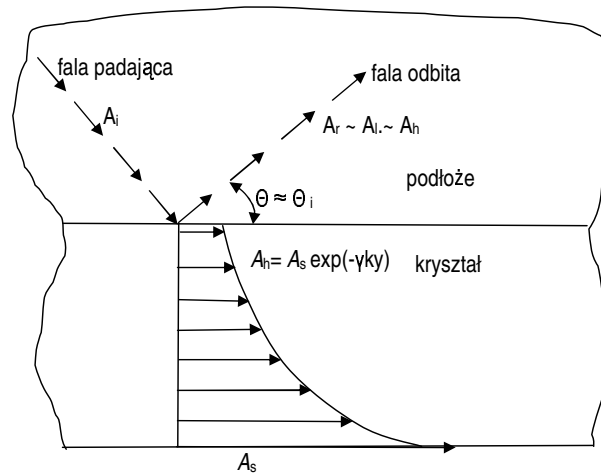
Rys. 1.2. Fale odciekające w strukturze warstwa na podłożu

Rezonansowe odbicie objętościowych fal akustycznych w obecności odciekających modów własnych po raz pierwszy zostało opisane w pracy Alshitsa i Lothe [13] dla sytuacji, gdy gałąź fali odciekającej pojawia się dla

naddźwiękowej fali Rayleigha w anizotropowym półnieskończonym ośrodku przy małych zaburzeniach kierunku propagacji. Tu omówimy wariant rezonansu, który jest wyjątkowy z dwu powodów:

1. jest uniwersalny dla dowolnego typu fal powierzchniowych w akustyce i optyce;
2. jest charakteryzowany przez wykładniczą zależność $v_l' \propto \exp(-2\gamma h)$, więc poprzez odpowiednie dopasowanie parametrów kontrolnych można otrzymać (przynajmniej w zasadzie) wykładniczo duże współczynniki wzbudzenia fal powierzchniowych.

Idea rezonansu jest pokazana na rys. 1.3: pojawia się on w sytuacji, gdy kąt padania fali objętościowej w podłożu jest taki, że fala odbita propaguje się wzdłuż kierunku $\theta = \theta_l$, czyli w kierunku objętościowej fali parcjalej własnego modu odciekającego. W takiej sytuacji w warstwie wzbudza się



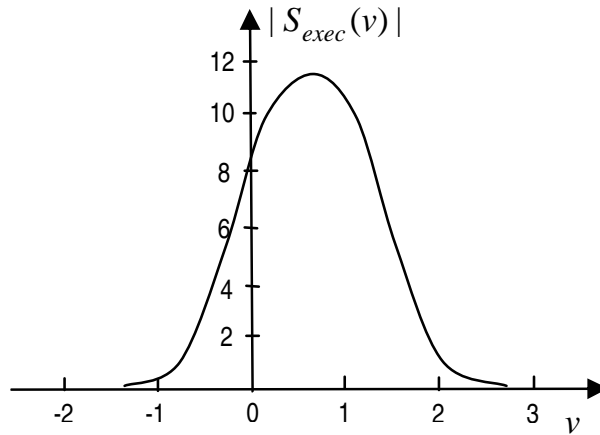
Rys. 1.3. Geometria odbicia rezonansowego

fala powierzchniowa z wykładniczo dużą amplitudą. Uwzględniając fakt, że amplitudy (ale nie fazy) fali padającej (A_i) i fali odbitej (A_r) muszą być równe, fala padająca musi w pełni kompensować wyciek energii od fali powierzchniowej do warstwy. Tak więc, amplituda A_s tej ostatniej nie będzie maleć wzdłuż powierzchni i prędkość fazowa v superpozycji wszystkich fal musi być rzeczywista.

Dokładne obliczenia pokazują, że we wszystkich przypadkach postać rezonansu jest opisana uniwersalną funkcją [6]

$$S_{exec}(v) = \frac{A_s}{A_l} = c \frac{\sqrt{v_l v_l'}}{v - v_l + i v_l'}, \quad (1.19)$$

gdzie C jest pewną bezwymiarową stałą rzędu jedności. Uwzględniając fakt, że $v_l' \sim v_l \exp(-2\gamma kh)$, okazuje się, że rezonans jest bardzo wąski i bardzo ostry (rys. 1.4).



Rys. 1.4. Schematyczna postać krzywej rezonansowej $|S_{exec}(v)|$ wzbudzenia fali powierzchniowej

Powyżej opisaliśmy mechanizm wzbudzania mocnej fali powierzchniowej w płycie krystalicznej poprzez specjalne odbicie słabej objętościowej fali pompującej w sąsiadującym podłożu. Oczywiście, nie dochodzi tu do złamania prawa zachowania energii. Powyższe rozważania i równanie (1.19) wykorzystują opis stacjonarny, co automatycznie wyłącza problem źródeł energii fali powierzchniowej. Z drugiej strony jest oczywiste, że dla niestacjonarnego postawienia zagadnienia, kiedy początek czasu odpowiada włączeniu padającej pompującej fali w podłożu, czas potrzebny na przejście układu do stanu stacjonarnego w celu dostarczenia niezbędnej gęstości energii w fali propagującej się w płycie krystalicznej powinien być tym dłuższy, im większa jest wartość $S_{exec} = A_s/A_i$.

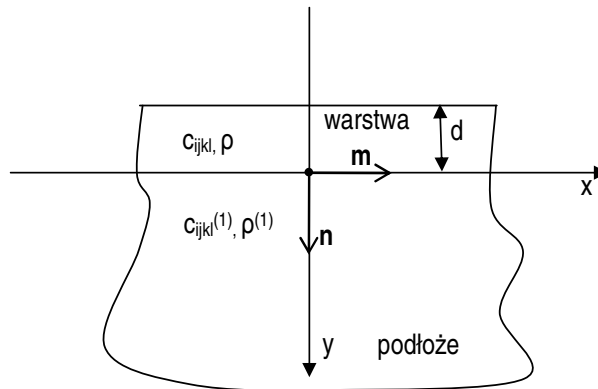
Istnieją jednakże jeszcze inne fizyczne ograniczenia zapobiegające nieograniczonemu wykładniczemu wzrostowi współczynnika wzbudzenia fali powierzchniowej wraz ze wzrostem parametru hk . Jednym z nich jest naturalne rozpraszanie wiązek falowych, używanych w zastosowaniach praktycznych zamiast fal płaskich.

1.3. Fale sprężyste w anizotropowej strukturze warstwa na podłożu

Do opisu propagacji fal w anizotropowej strukturze warstwa na podłożu, czyli w strukturze bikrystalicznej, zastosujemy odpowiednio zmodyfikowany [8] formalizm zaproponowany przez Stroha [139]. W tej strukturze rozpatrzmy ogólnie zagadnienie o odbiciu i o falach własnych. Jako przykład zastosowania rozwiniętej metodologii zostanie rozwiązane zadanie propagacji fal w materiale poprzecznie izotropowym [7].

1.3.1. Sformułowanie zagadnienia i związki wyjściowe

Geometria zadania została sformułowana w pracy [8], a pokazana jest na rys. 1.5. Stałe materiałowe oraz gęstość warstwy i podłoża dane są odpowiednio przez c_{ijkl} , $c_{ijkl}^{(1)}$ oraz ρ i $\rho^{(1)}$.



Rys. 1.5. Geometria zadania warstwa na podłożu

Pola przemieszczeń będziemy poszukiwać w postaci

$$\begin{aligned}\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{U}(y) e^{ik(x-vt)}, \\ \mathbf{u}^{(1)}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{U}^{(1)}(y) e^{ik(x-vt)},\end{aligned}\quad (1.20)$$

gdzie $v = \omega/k$ – prędkość fazowa, \mathbf{k} – wektor falowy, $k = \mathbf{k} \cdot \mathbf{m}$ – rzut wektora \mathbf{k} na powierzchnię, \mathbf{m} , \mathbf{n} – wersory odpowiednio wzdłuż osi x i y . Warunki graniczne i warunki ciągłości na swobodnej granicy $y = -d$ i na granicy kontaktu dwu ośrodków $y = 0$ formułujemy następująco:

$$\mathbf{F}(-d) = 0, \quad (1.21)$$

gdzie \mathbf{F} – amplituda siły, $\mathbf{f} = \hat{\sigma} \mathbf{n}$,

$$\begin{aligned}\mathbf{f}(\mathbf{r}, t) &= -ik \mathbf{F}(y) e^{ik(x-vt)}, \\ \mathbf{f}^{(1)}(\mathbf{r}, t) &= -ik \mathbf{F}^{(1)}(y) e^{ik(x-vt)},\end{aligned}\quad (1.22)$$

a jeśli powierzchnia swobodna nie dopuszcza przemieszczeń, to

$$\mathbf{U}(-d) = 0. \quad (1.23)$$

W obu przypadkach na granicy rozdziału $y = 0$ oczekujemy spełnienia warunków ciągłości przemieszczeń i równowagi sił

$$\begin{aligned}\mathbf{U}(0) &= \mathbf{U}^{(1)}(0), \\ \mathbf{F}(0) &= \mathbf{F}^{(1)}(0).\end{aligned}\quad (1.24)$$

Tutaj zastosujemy formalizm Stroha, odpowiednio przystosowany do omawianego zadania. Podstawowym elementem formalizmu Stroha⁴ jest sześcioelementowy wektor $\boldsymbol{\eta}(y)$ (porównaj równanie (1.16)), którego poszczególne składowe to amplitudy wektora przemieszczeń i amplitudy wektora sił:

$$\boldsymbol{\eta}(y) = \begin{bmatrix} \mathbf{U}(y) \\ \mathbf{F}(y) \end{bmatrix}.$$

⁴ Formalizm Stroha jest łatwo adoptowalny do bardziej skomplikowanych sytuacji fizycznych. Dla ciał wrażliwych na oddziaływania elektromagnetyczne, takich jak na przykład piezoelektryki, wykorzystuje się wektor ośmioelementowy, rozszerzony do używanego tu wektora $\boldsymbol{\eta}$ o ładunek elektryczny q i potencjał skalarny φ [25].

Wektor $\boldsymbol{\eta}(y)$ można przedstawić w postaci następującej superpozycji:

$$\boldsymbol{\eta}(y) = \sum_{\gamma=1}^6 b_{\gamma} \boldsymbol{\xi}_{\gamma} e^{ikp_{\gamma}y}, \quad (1.25)$$

gdzie b_{γ} – amplitudy parcjalne, a 6-wektory $\boldsymbol{\xi}_{\gamma}$ i parametry p_{γ} – wektory i wartości własne macierzy Stroha \mathbf{N} , dla której zagadnienie własne ma postać

$$\mathbf{N} \boldsymbol{\xi}_{\gamma} = p_{\gamma} \boldsymbol{\xi}_{\gamma}. \quad (1.26)$$

Macierz Stroha \mathbf{N} ma wymiar 6×6 i posiada następującą strukturę:

$$\mathbf{N} = - \begin{bmatrix} (nn)^{-1}(nm) & (nn)^{-1} \\ (mn)(nn)^{-1}(nm) - (mm) & (mn)(nn)^{-1} \end{bmatrix}, \quad (1.27)$$

gdzie bloki 3×3 są zbudowane z macierzy typu (mn) o składowych

$$(mn)_{il} = m_j c_{ijkl}^* n_k, \quad (1.28)$$

a tensor modułów sprężystości jest przenormowany do postaci:

$$c_{ijkl}^* = c_{ijkl} - \rho v^2 \delta_{il} \delta_{j1} \delta_{k1}. \quad (1.29)$$

Dla podłoża można zastosować analogiczne podejście, i wtedy

$$\boldsymbol{\eta}^{(1)}(y) = \begin{bmatrix} \mathbf{U}^{(1)}(y) \\ \mathbf{F}^{(1)}(y) \end{bmatrix} = \sum_{\gamma=1}^6 b_{\gamma}^{(1)} \boldsymbol{\xi}_{\gamma}^{(1)} e^{ikp_{\gamma}^{(1)}y}. \quad (1.30)$$

Tu czasami niezerowych składowych wektora (1.30) może być mniej niż 6, gdyż z żądania skończoności pola $\boldsymbol{\eta}^{(1)}(y)$ dla $y \rightarrow \infty$, niektóre z amplitud $b_{\gamma}^{(1)}$ mogą być równe zeru.

Sześcioelementowe wektory Stroha $\boldsymbol{\xi}$ składają się z dwu trzylementowych wektorów

$$\boldsymbol{\xi}_{\gamma} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{\gamma} \\ \mathbf{L}_{\gamma} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\xi}_{\gamma}^{(1)} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{\gamma}^{(1)} \\ \mathbf{L}_{\gamma}^{(1)} \end{bmatrix}, \quad (1.31)$$

gdzie \mathbf{A}_{γ} – wektory polaryzacji przemieszczeń fal parcjalnych, a \mathbf{L}_{γ} – wektory kierunkowe sił parcjalnych. W tych oznaczeniach warunki swobodnej

(1.21) lub umocowanej powierzchni (1.23) sprowadzają się do następujących równań:

$$\begin{aligned} \sum_{\gamma=1}^6 b_{\gamma} \mathbf{L}_{\gamma} \exp(-iKp_{\gamma}) &= 0, \\ \sum_{\gamma=1}^6 b_{\gamma} \mathbf{A}_{\gamma} \exp(-iKp_{\gamma}) &= 0, \end{aligned} \quad (1.32)$$

gdzie

$$K = kd, \quad (1.33)$$

a warunki ciągłości (1.24) można przedstawić jednym równaniem

$$\sum_{\gamma=1}^6 b_{\gamma} \boldsymbol{\xi}_{\gamma} = \sum_{\gamma=1}^6 b_{\gamma}^{(1)} \boldsymbol{\xi}_{\gamma}^{(1)}. \quad (1.34)$$

Stroh [139] pokazał, że wektory własne $\boldsymbol{\xi}_{\gamma}$ i $\boldsymbol{\xi}_{\gamma}^{(1)}$ spełniają następujące warunki ortogonalności

$$\boldsymbol{\xi}_{\gamma} \cdot \mathbf{T} \boldsymbol{\xi}_{\beta} = \delta_{\gamma\beta}, \quad \boldsymbol{\xi}_{\gamma}^{(1)} \cdot \mathbf{T} \boldsymbol{\xi}_{\beta}^{(1)} = \delta_{\gamma\beta}, \quad (1.35)$$

i zupełności

$$\boldsymbol{\xi}_{\gamma} \otimes \mathbf{T} \boldsymbol{\xi}_{\beta} = \mathbf{I}, \quad \boldsymbol{\xi}_{\gamma}^{(1)} \otimes \mathbf{T} \boldsymbol{\xi}_{\beta}^{(1)} = \mathbf{I}, \quad (1.36)$$

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{I} \\ \mathbf{I} & \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad (1.37)$$

gdzie $\delta_{\gamma\beta}$ – symbol Kroneckera, \mathbf{I} – macierze jednostkowe wymiaru 6×6 we wzorze (1.36) i 3×3 we wzorze (1.37), a symbol \otimes – iloczyn diadyczny. Równanie (1.34) można rozwiązać ze względu na b_{γ} wykorzystując właściwość ortogonalności (1.35) wektorów $\boldsymbol{\xi}_{\gamma}$

$$b_{\gamma} = \sum_{\alpha=1}^6 b_{\alpha}^{(1)} a_{\alpha\gamma}, \quad (1.38)$$

gdzie

$$a_{\alpha\gamma} = \boldsymbol{\xi}_{\alpha}^{(1)} \cdot \mathbf{T} \boldsymbol{\xi}_{\gamma} = \mathbf{A}_{\alpha}^{(1)} \cdot \mathbf{L}_{\gamma} + \mathbf{L}_{\alpha}^{(1)} \cdot \mathbf{A}_{\gamma}. \quad (1.39)$$

Wykorzystując równania (1.25), (1.30) i (1.38) pola falowe (1.20) i (1.22) można przedstawić w bardziej zwartej postaci

$$\begin{bmatrix} \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \\ (i/k)\mathbf{f}(\mathbf{r}, t) \end{bmatrix} = \sum_{\alpha=1}^6 b_{\alpha}^{(1)} \zeta_{k\alpha}(y) e^{ik(x-vt)}, \quad (1.40)$$

gdzie sześciokładnikowa funkcja $\zeta_{k\alpha}(y)$ zdefiniowana jest następująco:

$$\zeta_{k\alpha}(y) = \begin{bmatrix} \mathcal{A}_{k\alpha}(y) \\ \mathcal{L}_{k\alpha}(y) \end{bmatrix} = \begin{cases} \sum_{\gamma=1}^6 a_{\alpha\gamma} \xi_{\gamma} e^{ikp_{\gamma}y}, & -d \leq y < 0, \\ \sum_{\gamma=1}^6 a_{\alpha\gamma} \xi_{\gamma}^{(1)} e^{ikp_{\gamma}^{(1)}y}, & 0 \leq y < \infty. \end{cases} \quad (1.41)$$

Warunki graniczne w tych oznaczeniach zapisują się odpowiednio na powierzchni swobodnej i zamocowanej następująco:

$$\sum_{\alpha} b_{\alpha}^{(1)} \mathcal{L}_{K\alpha} = 0, \quad \sum_{\alpha} b_{\alpha}^{(1)} \mathcal{A}_{K\alpha} = 0, \quad (1.42)$$

gdzie $\mathcal{L}_{K\alpha} = \mathcal{L}_{k\alpha}(-d)$, $\mathcal{A}_{K\alpha} = \mathcal{A}_{k\alpha}(-d)$. Warunki ciągłości są spełnione automatycznie.

Rozpatrzmy teraz zagadnienie odbicia fali. Prędkość v jest znana, gdyż wielkość jej jednoznacznie określa wybór kąta padania fali objętościowej na powierzchnię padania. Jest ona z przedziału $v_1^{(1)} < v < v_2^{(1)}$, gdzie prędkości $v_1^{(1)}$ i $v_2^{(1)}$ wyznaczają pierwszy przedział prędkości. Zakładamy, że znamy również wartość amplitudy $b_i^{(1)}$ fali padającej. Możemy więc znaleźć amplitudy $b_{\alpha}^{(1)}$, a następnie na podstawie wzorów (1.38) i (1.39) znaleźć amplitudy b_{γ} w warstwie. Można pokazać [8], że dla swobodnej granicy warstwy

$$b_{\alpha}^{(1)} = C [\mathcal{L}_{-K\alpha}, \mathcal{L}_{K1}^*, \mathcal{L}_{K2}^*], \quad \alpha = 1, 2, 3(r), 6(i), \quad (1.43)$$

gdzie nawias kwadratowy oznacza iloczyn mieszany wektorów, a stała C – mnożnik skalarny wyznaczany na podstawie znanej wartości amplitudy $b_i^{(1)}$. Fale ze wskaźnikami $\alpha = 4, 5$ są tożsamościowo równe zeru, co oznacza, że w warstwie nie występują fale niefizyczne.

Współczynnik odbicia fali to stosunek amplitudy fali odbitej do amplitudy fali padającej. W naszym przypadku wynosi on

$$R = \frac{b_r^{(1)}}{b_i^{(1)}} = \frac{[\mathcal{L}_{-Kr}, \mathcal{L}_{K1}^*, \mathcal{L}_{K2}^*]}{[\mathcal{L}_{-Ki}, \mathcal{L}_{K1}^*, \mathcal{L}_{K2}^*]}. \quad (1.44)$$

Nie uwzględniamy tu dyssypacji fali, więc $|R| = 1$.

Podobnie dla warstwy zamocowanej mamy

$$b_\alpha^{(1)} = C [\mathcal{A}_{-K\alpha}, \mathcal{A}_{K1}^*, \mathcal{A}_{K2}^*], \quad \alpha = 1, 2, 3(r), 6(i), \quad (1.45)$$

oraz

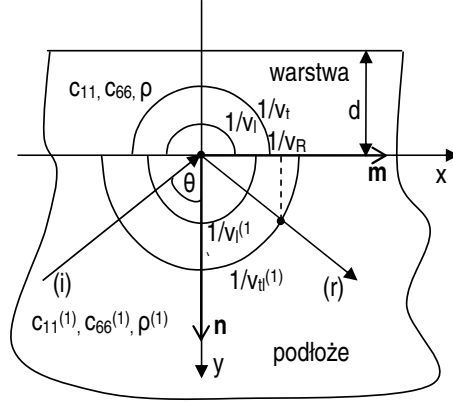
$$R = \frac{b_r^{(1)}}{b_i^{(1)}} = \frac{[\mathcal{L}_{-Kr}, \mathcal{A}_{K1}^*, \mathcal{A}_{K2}^*]}{[\mathcal{A}_{-Ki}, \mathcal{L}_{K1}^*, \mathcal{L}_{K2}^*]}. \quad (1.46)$$

1.3.2. Propagacja fal w ośrodku poprzecznie izotropowym

Zastosujmy omówiony powyżej formalizm do badania propagacji fal w kryształach o strukturze heksagonalnej. Ograniczymy się do omówienia zachowania się pola falowego wzdłuż płaszczyzny prostopadłej do głównych osi kryształów. Podobnie jak i w innych płaszczyznach symetrii, powstają tu różniące się polaryzacjami dwie niezależne rodziny fal: fale poprzeczne, spolaryzowane prostopadle do płaszczyzny symetrii i fale podłużne z polaryzacją w płaszczyźnie propagacji. Tu rozpatrzmy tylko przypadek fal poprzecznych w warunkach rezonansowego odbicia w pobliżu własnej mody odciekającej, czyli sytuację, gdy prędkość fali Rayleigha na swobodnej powierzchni warstwy należy do przedziału prędkości fal objętościowych w podłożu. W takim przypadku, wykładniczo słabe pole fali powierzchniowej na powierzchni rozdziału kryształów jest unoszone w głąb podłoża przez objętościową falę „ucieczki” – to właśnie jest rozpatrywana własna moda odciekająca. Rezonansowe odbicie fali ma miejsce wtedy, gdy kąt padania fali w podłożu na złącze jest tak dobrany, aby fala odbita miała kierunek zbliżony do kierunku fali „ucieczki”. Równocześnie na powierzchni swobodnej wzbudza się fala powierzchniowa o rosnącej wykładniczo amplitudzie. Jak pokazano w [8], w tym przypadku obszar istnienia rezonansu w zależności od kąta padania jest wykładniczo wąski, co w rzeczywistym eksperymencie wymusza ostre warunki dotyczące rozbieżności wiązki fali akustycznej. Obliczenia pokazują, że można tak dobrać fizyczne parametry zadania, aby amplituda fali powierzchniowej w warstwie wzbudzonej w sposób rezonansowy przewyższała kilkadziesiąt razy intensywność fali „pompującej”.

Efekty rezonansowe w pobliżu modów odciekających w strukturach heksagonalnych były już rozpatrywane, ale w dla zupełnie odmiennych sytuacji

granicznych: w pracy Darinskiego [40] – cienka warstwa na półnieskończonym podłożu i w pracy Alshitsa i innych [6] – materiały warstwy i podłoża miały istotnie różne właściwości sprężyste.



Rys. 1.6. Geometria i stałe materiałowe zadania warstwy na podłożu w przypadku poprzecznej izotropii

Niech nasza bikrystaliczna struktura warstwowa (warstwa na podłożu) [7] składa się z dwu heksagonalnych kryształów o równoległych osiach głównych (rys. 1.6). Właściwości mechaniczne takich kryształów są w pełni opisane przez dwie stałe materiałowe c_{11} i c_{66} , przez gęstość masy ρ dla warstwy i przez odpowiednie stałe z indeksem (1) dla podłoża. Prędkości fal objętościowych podłużnych (l) i poprzecznych (t) dane są więc odpowiednio w warstwie i w podłożu wzorami:

$$\begin{aligned} v_l &= \sqrt{\frac{c_{11}}{\rho}}, & v_t &= \sqrt{\frac{c_{66}}{\rho}}, \\ v_l^{(1)} &= \sqrt{\frac{c_{11}^{(1)}}{\rho^{(1)}}}, & v_t^{(1)} &= \sqrt{\frac{c_{66}^{(1)}}{\rho^{(1)}}}. \end{aligned} \quad (1.47)$$

Z warunków stabilności wynika, że $c_{66} < c_{11}$ i $c_{66}^{(1)} < c_{11}^{(1)}$, więc $v_l < v_t$ i $v_l^{(1)} < v_t^{(1)}$.

Fale sprężyste pola przemieszczeń można przedstawić jako superpozycję fal płaskich

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\alpha} b_{\alpha} \mathbf{A}_{\alpha} \exp\{ik(x + p_{\alpha}y - vt)\}, \quad (1.48)$$

o tej samej częstotliwości kołowej ω i z jednakowymi rzutami wektora falowego \mathbf{k} na powierzchnię rozdziału kryształów $k = \mathbf{k} \cdot \mathbf{m}$, a w konsekwencji z jednakowymi prędkościami fazowymi równymi $v = \omega/k$. Każda z fal parcjalnych jest opisana jednakże przez własny rzut wektora falowego na normalną do powierzchni, $\mathbf{k} \cdot \mathbf{n} = p_\alpha k$, polaryzację \mathbf{A}_α i amplitudę b_α . Odpowiednie pole sił sprężystych w fali wynosi

$$\mathbf{f}(\mathbf{r}, t) = -ik \sum_{\alpha} b_{\alpha} \mathbf{L}_{\alpha} \exp\{ik(x + p_{\alpha}y - vt)\}, \quad (1.49)$$

i powinno zniknąć na swobodnej powierzchni $y = -d$. Warunek ten pozwala wyznaczyć amplitudy b_{α} z układu równań

$$\sum_{\alpha} b_{\alpha} \mathbf{L}_{\alpha} \exp(-ikp_{\alpha}d) = 0. \quad (1.50)$$

W równaniach (1.48) i (1.49) superpozycja fal płaskich w warstwie zawiera cztery fale parcjalne, które w interesującym nas obszarze $v < v_t$ tworzą pary sprzężone zespolono [8]

$$p_{\gamma+3} = p_{\gamma}^*, \quad \mathbf{A}_{\gamma+3} = \mathbf{A}_{\gamma}^*, \quad \mathbf{L}_{\gamma+3} = \mathbf{L}_{\gamma}^*, \quad \gamma = 1, 2. \quad (1.51)$$

gdzie zgodnie z [12] i [139] mamy

$$p_1 = i\sqrt{1 - \left(\frac{v}{v_l}\right)^2}, \quad p_2 = i\sqrt{1 - \left(\frac{v}{v_t}\right)^2}. \quad (1.52)$$

$$\mathbf{A}_1 = \varepsilon_1 \begin{bmatrix} 1 \\ p_1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A}_2 = \varepsilon_2 \begin{bmatrix} -p_2 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (1.53)$$

$$\mathbf{L}_1 = \varepsilon_1 \begin{bmatrix} -2c_{66}p_1 \\ \bar{X}_{66} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{L}_2 = -\varepsilon_2 \begin{bmatrix} \bar{X}_{66} \\ 2c_{66}p_2 \\ 0 \end{bmatrix},$$

$$\bar{X}_{66} = 2c_{66} - \rho v^2, \quad \varepsilon_{\alpha} = i \frac{1}{\sqrt{2p_{\alpha}\rho v^2}}, \quad \alpha = 1, 2. \quad (1.54)$$

W podłożu obowiązują analogiczne wzory, ale z indeksem (1).

W zagadnieniu odbicia w zakresie prędkości $v_t^{(1)} < v < \min\{v_l^{(1)}, v_t\}$ (patrz rys. 1.6) pola falowe składają się z trzech fal: dwu fal objętościowych –

fali padającej ($\alpha = i$) i fali odbitej ($\alpha = r$) – i jednej fali niejednorodnej ($\alpha = 1$). Czwarta fala parcjalna ($\alpha = 2$), rosnąca wykładniczo wraz z oddalaniem się od złącza w głąb podłoża, jest niefizyczna i w wyniku superpozycji typu (1.48) i (1.49) znika ($b_2^{(1)}$). Zauważmy, że tu wielkość prędkości v jest sztywno związana z kątem padania: $\sin \theta = v_t^{(1)}/v$ (rys. 1.6). Dodatkowo, zgodnie z [12], [139]:

$$p_i^{(1)} = -\sqrt{\left(\frac{v}{v_t^{(1)}}\right)^2 - 1} = -\operatorname{tg} \theta, \quad p_r^{(1)} = \sqrt{\left(\frac{v}{v_t^{(1)}}\right)^2 - 1} = \operatorname{tg} \theta, \quad (1.55)$$

$$p_1^{(1)} = i\sqrt{1 - \left(\frac{v}{v_t^{(1)}}\right)^2},$$

$$\mathbf{A}_i^{(1)} = \varepsilon_i^{(1)} \begin{bmatrix} -2p_i^{(1)} \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{L}_i^{(1)} = -\varepsilon_i^{(1)} \begin{bmatrix} \overline{X}_{66}^{(1)} \\ 2c_{66}^{(1)} p_i^{(1)} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (1.56)$$

$$\varepsilon_i^{(1)} = -\frac{1}{\sqrt{2p_r^{(1)} \rho^{(1)} v^2}},$$

$$\mathbf{A}_r^{(1)} = \varepsilon_r^{(1)} \begin{bmatrix} -p_r^{(1)} \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{L}_r^{(1)} = -\varepsilon_r^{(1)} \begin{bmatrix} \overline{X}_{66}^{(1)} \\ 2c_{66}^{(1)} p_r^{(1)} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (1.57)$$

$$\varepsilon_r^{(1)} = -\frac{1}{\sqrt{2p_r^{(1)} \rho^{(1)} v^2}},$$

$$\mathbf{A}_1^{(1)} = \varepsilon_1^{(1)} \begin{bmatrix} 1 \\ p_1^{(1)} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{L}_1^{(1)} = -\varepsilon_1^{(1)} \begin{bmatrix} -2c_{66}^{(1)} p_1^{(1)} \\ \overline{X}_{66}^{(1)} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (1.58)$$

$$\varepsilon_1^{(1)} = \frac{i}{\sqrt{2p_1^{(1)} \rho^{(1)} v^2}},$$

$$\overline{X}_{66}^{(1)} = 2c_{66}^{(1)} - \rho^{(1)} v^2. \quad (1.59)$$

Jak pokazano w [8], przy odbiciu fal na swobodnej powierzchni warstwy, amplitudy parcjalnych fal w warstwie b_α są związane z amplitudami fal parcjalnych w podłożu związkiem

$$b_\gamma = \sum_{\alpha=1,i,r} b_\alpha^{(1)} a_{\alpha\gamma}, \quad \gamma = 1, 2, 4, 5. \quad (1.60)$$

gdzie

$$a_{\alpha\gamma} = \mathbf{A}_\alpha^{(1)} \cdot \mathbf{L}_\gamma^{(1)} + \mathbf{L}_\alpha^{(1)} \cdot \mathbf{A}_\gamma^{(1)}. \quad (1.61)$$

Wyrażenia na współczynniki $a_{\alpha\gamma}$ otrzymujemy ze wzorów (1.53) i (1.56) – (1.58):

$$\begin{aligned} a_{11} &= \psi_{11}, & a_{12} &= -\varphi_{12}, & a_{14} &= \psi_{14}, & a_{15} &= -\varphi_{15}, \\ a_{21} &= \varphi_{21}, & a_{22} &= \psi_{22}, & a_{24} &= \varphi_{24}, & a_{25} &= \psi_{25}, \\ a_{r1} &= \varphi_{r1}, & a_{r2} &= \psi_{r2}, & a_{r4} &= \varphi_{r4}, & a_{r5} &= \psi_{r5}, \\ a_{i1} &= \varphi_{i1}, & a_{i2} &= \psi_{i2}, & a_{i4} &= \varphi_{i4}, & a_{i5} &= \psi_{i5}, \end{aligned} \quad (1.62)$$

gdzie

$$\begin{aligned} \varphi_{\alpha\beta} &= \varepsilon_\alpha^{(1)} \varepsilon_\beta (2p_\alpha p_\beta \Delta_1 + \Delta_2), \\ \psi_{\alpha\beta} &= \varepsilon_\alpha^{(1)} \varepsilon_\beta (p_\alpha \Delta_3 + p_\beta \Delta_4), \end{aligned} \quad (1.63)$$

$$\begin{aligned} \Delta_1 &= c_{66} - c_{66}^{(1)}, & \Delta_2 &= \overline{X}_{66} - \overline{X}_{66}^{(1)}, \\ \Delta_3 &= \overline{X}_{66} - 2c_{66}^{(1)}, & \Delta_4 &= \overline{X}_{66}^{(1)} - 2c_{66}. \end{aligned} \quad (1.64)$$

Jeśli wprowadzimy teraz wektory uogólnionych przemieszczeń $\mathcal{A}_{k\alpha}(y)$ i sił $\mathcal{L}_{k\alpha}(y)$ (porównaj (1.41)) w postaci ($\alpha = 1, 2, 4, 5$)

$$\begin{bmatrix} \mathcal{A}_{k\alpha}(y) \\ \mathcal{L}_{k\alpha}(y) \end{bmatrix} = \begin{cases} \sum_{\gamma=1,2,4,5} a_{\alpha\gamma} \boldsymbol{\xi}_\gamma e^{ikp_\gamma y}, & -d \leq y < 0, \\ \boldsymbol{\xi}_\gamma^{(1)} e^{ikp_\gamma^{(1)} y}, & 0 \leq y < \infty, \end{cases} \quad (1.65)$$

a $\boldsymbol{\xi}_\gamma$ i $\boldsymbol{\xi}_\gamma^{(1)}$ dane są wzorem (1.31). Postępując zgodnie z metodą pokazaną w poprzednim podrozdziale, otrzymujemy następujące wyrażenie na amplitudy fal w podłożu

$$b_\alpha^{(1)} = C D(\mathcal{L}_{-K\alpha}, \mathcal{L}_{K1}^*), \quad \alpha = 1, i, r, \quad (1.66)$$

gdzie

$$D(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = a_x b_y - a_y b_x, \quad (1.67)$$

$$\mathcal{L}_{K\alpha} = \mathcal{L}_{k\alpha}(-d), \quad K = k d, \quad (1.68)$$

a stała C jest wyznaczana ze znanej amplitudy fali padającej. Tak więc, falowe pole przemieszczeń i sił w całej strukturze przyjmuje postać

$$\begin{bmatrix} \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \\ (i/k)\mathbf{f}(\mathbf{r}, t) \end{bmatrix} = C \sum_{\alpha=1,i,r} D(\mathcal{L}_{-K\alpha}, \mathcal{L}_{K1}^*) \begin{bmatrix} \mathcal{A}_{k\alpha}(y) \\ \mathcal{L}_{k\alpha}(y) \end{bmatrix} e^{ik(x-vt)}. \quad (1.69)$$

Równanie (1.69) wraz z zależnościami wprowadzonych parametrów (1.51) – (1.59) od stałych materiałowych i od prędkości v (od kąta padania θ) stanowi pełne analityczne rozwiązanie zadania odbicia fal w strukturze warstwa na podłożu dla kryształów heksagonalnych. Współczynnik odbicia, z uwzględnieniem wyrażenia (1.66), wynosi

$$R = \frac{b_r^{(1)}}{b_i^{(1)}} = \frac{D(\mathcal{L}_{-Kr}, \mathcal{L}_{K1}^*)}{D(\mathcal{L}_{-Ki}, \mathcal{L}_{K1}^*)}. \quad (1.70)$$

Współczynnik wzbudzenia parcjalnej mody γ w warstwie χ_γ został zdefiniowany w pracy [8] jako stosunek amplitudy tej mody na swobodnej górnej powierzchni granicznej struktury do amplitudy fali padającej w warstwie,

$$\chi_\gamma = \frac{b_\gamma e^{-iKp_\gamma}}{b_i^{(1)}}. \quad (1.71)$$

W zależności od v – wielkości prędkości fali objętościowej w podłożu na granicy rozdziału z warstwą, można w warstwie wzbudzać różne rozkłady modów falowych. Wielkością prędkości v można sterować, zmieniając θ – kąt padania fali. Najbardziej ciekawe wyniki można oczekiwać dla prędkości v mało odległych od prędkości własnych struktury. W granicy wystarczająco grubej warstwy, czyli dla

$$\exp(K |p_\gamma|) \gg 1, \quad \gamma = 1, 2, \quad (1.72)$$

rozwiązaniem własnym na swobodnej powierzchni warstwy jest dwuparcjalna fala typu Rayleigha, nieco zmieniona istnieniem podłoża. Prędkość takiej fali $v_s = v_R + \Delta v$, będąca pierwiastkiem równania dyspersyjnego

$$D(\mathcal{L}_{K1}, \mathcal{L}_{K2}) = 0, \quad (1.73)$$

powinna niewiele różnić się od niewzbudzonej prędkości Rayleigha v_R , zerującej wyznacznik

$$D(\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2) = 0. \quad (1.74)$$

Dla $v < v_t^{(1)}$, gdy wszystkie mody w podłożu są niejednorodne, Δv jest wielkością rzeczywistą. Jeśli v_R jest z tak zwanego przedziału międzydźwiękowego, czyli z przedziału $v_t^{(1)} < v < v_l^{(1)}$ dla podłoża, powinna w niej powstawać fala ucieczki, odprowadzająca energię od granicy rozdziału struktury. Ten fakt wyraża zespolona prędkość danego rozwiązania własnego, nazywanego rozwiązaniem własnym typu odciekającego. W tej sytuacji poprawka Δv jest zespolona, a jej obliczenie metodą pokazaną w pracy [8] daje w wyniku

$$\Delta v = - \frac{\sum_{\alpha, \beta=1,2} D(\mathbf{L}_\alpha, \mathbf{L}_\beta^*) e^{iK(p_{3-\alpha} + p_\beta)} (a_{1\alpha} a_{r\beta+3} - a_{r\alpha} a_{1-\beta+3})}{(\psi_{11}\psi_{r2} - \varphi_{12}\varphi_{r1}) \frac{\partial}{\partial v} D(\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2)} \Bigg|_{v_R}. \quad (1.75)$$

Prędkość v_s ma tu postać

$$v_s = v_l - i v_l', \quad v_l' = -\Im m \Delta v > 0.$$

Jak wynika ze wzoru (1.75), wielkość Δv jest rzędu

$$\Delta v \sim v_R e^{-2K|p_2|}. \quad (1.76)$$

Fakt, że prędkość jest wielkością zespoloną powoduje, że również i liczba falowa k też jest zespolona

$$k_s = k_l + i k_l' = \frac{\omega}{v_l - i v_l'} = \frac{\omega}{v_l} \left(1 + i \frac{v_l'}{v_l} \right), \quad (1.77)$$

$$k_l = \frac{\omega}{v_l}, \quad k_l' = k_l \frac{v_l'}{v_l}.$$

Gdy na strukturę pada fala z prędkością bliską v_l , to współczynniki odbicia (1.70) i wzbudzenia (1.71) przybierają charakter rezonansowy. Jak pokazano w pracy [8], współczynniki $b_i^{(1)}$ i $b_r^{(1)}$ dla rzeczywistych prędkości

v bliskich v_l są małe i mogą być przedstawione w postaci równań (1.78) i (1.79)

$$b_i^{(1)}(v) = b_i^{(1)}(v_i - iv_l') + (v - v_l + iv_l') \frac{\partial b_i^{(1)}}{\partial v} \Big|_{v_l - iv_l'} \quad (1.78)$$

$$(v - v_l + iv_l') \frac{\partial b_i^{(1)}}{\partial v} \Big|_{v_R},$$

$$b_r^{(1)}(v) = b_r^{(1)}(v_i - iv_l') + (v - v_l - iv_l') \frac{\partial b_r^{(1)}}{\partial v} \Big|_{v_l - iv_l'} \quad (1.79)$$

$$(v - v_l - iv_l') \frac{\partial b_r^{(1)}}{\partial v} \Big|_{v_R},$$

a współczynnik odbicia przyjmuje postać (1.80)

$$R = \left[\frac{\partial b_r^{(1)}/\partial v}{\partial b_i^{(1)}/\partial v} \right] \Big|_{v_R} \frac{(v - v_l - iv_l')}{(v - v_l + iv_l')}. \quad (1.80)$$

Taka rezonansowa struktura jest typowa dla opisywanej sytuacji i powoduje gwałtowną zmianę fazy R w otoczeniu punktu v_l . Szerokość obszaru rezonansowego jest bardzo mała (określa ją wzór (1.76)). Jeszcze większą rolę odgrywa struktura mianownika we wzorze (1.71) na współczynnik wzbudzenia, czyli amplitudy $b_i^{(1)}$ danej wzorem (1.78) w warunkach rezonansu.

Konkretne obliczenia prowadzone w formie analitycznej są bardzo żmudne. Niżej ograniczymy się do pokazania tylko najważniejszych związków. W szczególności, wektory sił uogólnionych, konieczne do obliczenia amplitud falowych w podłożu $b_\alpha^{(1)}$ danych wzorem (1.39) mają postać

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{K1} &= \psi_{11} \mathbf{L}_1 e^{K|p_1|} - \varphi_{12} \mathbf{L}_2 e^{K|p_2|} + \psi_{14} \mathbf{L}_4 e^{-K|p_1|} - \varphi_{15} \mathbf{L}_5 e^{-K|p_2|}, \\ \mathcal{L}_{-Ki} &= \varphi_{i1} \mathbf{L}_1 e^{-K|p_1|} + \psi_{i2} \mathbf{L}_2 e^{-K|p_2|} + \varphi_{i4} \mathbf{L}_4 e^{K|p_1|} + \psi_{i5} \mathbf{L}_5 e^{K|p_2|}, \\ \mathcal{L}_{-Kr} &= \varphi_{r1} \mathbf{L}_1 e^{-K|p_1|} + \psi_{r2} \mathbf{L}_2 e^{-K|p_2|} + \varphi_{r4} \mathbf{L}_4 e^{K|p_1|} + \psi_{r5} \mathbf{L}_5 e^{K|p_2|}. \end{aligned} \quad (1.81)$$

Jeśli uwzględnić właściwość $\mathcal{L}_{K1}^* = \mathcal{L}_{-K4}$ udowodnioną w [8] i wzory (1.81), to amplitudy fal w warstwie przyjmują postać następujących sum:

$$\begin{aligned}
b_1^{(1)} = & -(\psi_{11}\varphi_{42} - \varphi_{12}\psi_{14})D(\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2) e^{-K(|p_1|+|p_2|)} \\
& + (\psi_{11}\psi_{44} - \psi_{14}\psi_{41})D(\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_1^*) \\
& - (\varphi_{12}\varphi_{45} - \varphi_{15}\psi_{14})D(\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2^*) e^{K(|p_2|-|p_1|)} \\
& + (\varphi_{12}\varphi_{45} - \varphi_{15}\varphi_{42})D(\mathbf{L}_2, \mathbf{L}_2^*) \\
& + (\psi_{14}\varphi_{42} - \varphi_{12}\psi_{44})D(\mathbf{L}_2, \mathbf{L}_1^*) e^{K(|p_1|-|p_2|)} \\
& - (\psi_{14}\varphi_{45} - \varphi_{15}\psi_{44})D(\mathbf{L}_1^*, \mathbf{L}_2^*) e^{K(|p_1|+|p_2|)},
\end{aligned} \tag{1.82}$$

$$\begin{aligned}
b_i^{(1)} = & -(\varphi_{i1}\varphi_{42} + \psi_{i2}\psi_{41})D(\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2) e^{-K(|p_1|+|p_2|)} \\
& + (\varphi_{i1}\psi_{44} - \varphi_{i4}\psi_{41})D(\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_1^*) \\
& - (\varphi_{i1}\varphi_{45} - \psi_{i5}\psi_{41})D(\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2^*) e^{K(|p_2|-|p_1|)} \\
& - (\psi_{i2}\varphi_{45} - \psi_{i5}\varphi_{42})D(\mathbf{L}_2, \mathbf{L}_2^*) \\
& + (\varphi_{i4}\varphi_{42} + \psi_{i2}\psi_{44})D(\mathbf{L}_2, \mathbf{L}_1^*) e^{iK(|p_1|-|p_2|)} \\
& - (\varphi_{i4}\varphi_{45} + \psi_{i5}\psi_{44})D(\mathbf{L}_1^*, \mathbf{L}_2^*) e^{K(|p_1|+|p_2|)}.
\end{aligned} \tag{1.83}$$

Wyrażenie określające amplitudę $b_r^{(1)}$ jest identyczne z (1.83), po dokonaniu zamiany wszystkich indeksów z i na r . Jeśli uwzględnimy oszacowanie (1.72), to stwierdzimy, że główny wkład do wielkości $b_\alpha^{(1)}$, ($\alpha = 1, i, r$), dają składniki zawierające człon wykładniczy $\exp[K(|p_1| + |p_2|)]$. Obliczenia amplitud b_α modów parcjalnych w warstwie na podstawie wzoru (1.60) pokazują, że amplitudy b_1 i b_2 odpowiadające modom rosnącym w kierunku swobodnej granicy struktury, nie zawierają składników proporcjonalnych do $\exp[K(|p_1| + |p_2|)]$ i z dokładnością do poprawek małych wykładniczo wynoszą

$$\begin{aligned}
b_1 \cong & [\psi_{11}(\psi_{11}\psi_{44} - \psi_{14}\psi_{41}) + \varphi_{i1}(\varphi_{i1}\psi_{44} - \varphi_{i4}\psi_{41}) \\
& + \varphi_{r1}(\varphi_{r1}\psi_{44} - \varphi_{r4}\psi_{41})]D(\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_1^*),
\end{aligned} \tag{1.84}$$

$$\begin{aligned}
b_2 \cong & [\varphi_{12}(\varphi_{12}\psi_{44} - \psi_{14}\varphi_{42}) + \psi_{i2}(\varphi_{i4}\varphi_{42} + \psi_{i2}\psi_{44}) \\
& + \psi_{r2}(\varphi_{r4}\varphi_{42} + \psi_{r2}\psi_{44})]D(\mathbf{L}_2, \mathbf{L}_1^*) e^{iK(|p_1|-|p_2|)}.
\end{aligned} \tag{1.85}$$

Z powyższych rozważań wynikają dwa wnioski. Po pierwsze, w przypadku nierezonansowym amplitudy te są wykładniczo mniejsze od amplitudy

fali padającej i odpowiadające im współczynniki wzbudzenia χ_γ (1.71) są wykładniczo małe. Po drugie, pozostawione człony w równaniach (1.84) i (1.85) są takie, że χ_1 i χ_2 są zawsze tego samego rzędu wielkości. Obliczenia dwu pozostałych amplitud fal parcjalnych w warstwie, czyli b_4 i b_5 , pokazują, że są one zawsze takiego samego rzędu co amplituda fali padającej i ich współczynniki wzbudzenia, zgodnie z (1.51), zawsze są wykładniczo małe, więc można je tu zaniedbać.

W przypadku rezonansowym, ze względu na niewielką różnicę wielkości prędkości v i pierwiastka v_R równania $D(\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2) = 0$, poprzednie główne wartości wyrażeń (1.82) i (1.83) przestają odgrywać taką rolę. Teraz, amplitudy b_1 i b_2 w warstwie są tego samego rzędu co amplitudy fal objętościowych w podłożu, a wielkości χ_1 i χ_2 , charakteryzujące amplitudy fal niejednorodnych na powierzchni struktury, są wykładniczo duże. Tak więc, ma tu miejsce rezonansowe wzbudzenie powierzchniowej fali dwuparcjalnej w warstwie pod wpływem padającej płaskiej fali w podłożu. Jednakże szerokość tego rezonansu jest mała względem oszacowania miary małości (1.76), więc w warunkach rzeczywistego eksperymentu, gdy zamiast płaskich fal propagują się wiązki fal akustycznych, te nie będą czuć tego rezonansu, jeśli w ten obszar padać będzie mała część wiązki. Ta sytuacja ostro ogranicza stosowanie wiązek rozbieżnych.

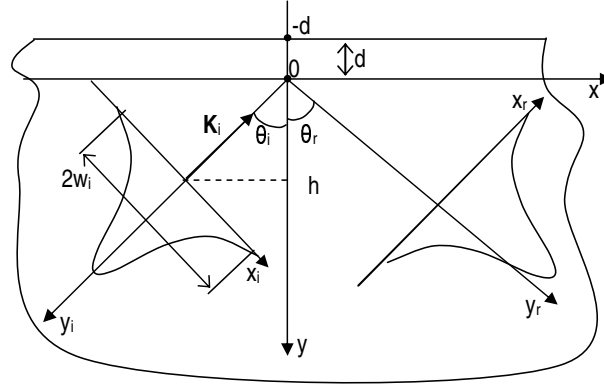
W związku z tym, przejdziemy teraz do określenia wielkości odpowiednich fizycznych parametrów, które pozwolą na rezonansowe wzbudzenia fal powierzchniowych pod wpływem słabo rozbieżnych padających wiązek fal akustycznych.

1.3.3. Odbicie ograniczonych wiązek fal akustycznych w ośrodku poprzecznie izotropowym

Niech na strukturę pada ograniczona gaussowska wiązka fali akustycznej. Można ją przedstawić w postaci [5]

$$\mathbf{u}_i^{(1)}(\mathbf{r}, t) = C \mathbf{A}_i^{(1)} \exp\left[-\left(\frac{x_i}{w_i}\right)^2 + i(\mathbf{K}_i \mathbf{r}_i - \omega t)\right], \quad (1.86)$$

gdzie \mathbf{r}_i – wektor wodzący, w_i – szerokość wiązki w układzie współrzędnych (x_i, y_i) , \mathbf{K}_i – wektor falowy wiązki (rys. 1.7). Płaszczyzna propagacji wiązki falowej leży w płaszczyznach poprzecznej izotropii kryształów heksagonalnych podłoża i warstwy, więc wektor prędkości grupowej jest



Rys. 1.7. Odbicie wiązki fali akustycznej od bikrystalicznej struktury w pobliżu rezonansu modu odciekającego dla $\theta_i = \theta_l$ ($\sin \theta_l = v_l^{(1)}/v_l$)

współliniowy z wektorem falowym \mathbf{K}_i . Zakładamy, że połowa szerokości wiązki jest duża w porównaniu z długością fali:

$$K_i w_i \gg 1. \quad (1.87)$$

Wykorzystując całkową transformację Fouriera, można przedstawić pole falowe wiązki (1.86) w postaci superpozycji fal płaskich [5]

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_i^{(1)}(\mathbf{r}, t) &= \frac{C \mathbf{A}_i^{(1)} e^{-i\omega t}}{2\pi \cos \theta_i} \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_i(k_x) \exp\{ik_x[(x + h \operatorname{tg} \theta_i) + p_i^{(1)}(y - h)]\} dk_x, \end{aligned} \quad (1.88)$$

gdzie $k_x \equiv k = \mathbf{k} \cdot \mathbf{m}$,

$$\Phi_i(k_x) = \sqrt{\pi} w_i \exp \frac{-w_i^2 (k_x - K_x)^2}{4 \cos^2 \theta_i}. \quad (1.89)$$

Warunek (1.87) pozwala zastosować dla $p_i^{(1)}$ rozkład Fresnela [5]

$$k_y^{(1)} \equiv p_i^{(1)} k_x \approx K_y + \operatorname{tg} \theta_i (k_x - K_x). \quad (1.90)$$

gdzie

$$K_x = K_i \sin \theta_i, \quad K_y = -K_i \cos \theta_i. \quad (1.91)$$

Rozkład dla $p_r^{(1)}$ ma postać analogiczną, ale należy tu jeszcze zmienić znak przed wyrażeniem. Wiązka odbita i fala powierzchniowa w podłożu opisywane są następującymi wzorami:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_r^{(1)}(\mathbf{r}, t) &= \frac{C e^{-i\omega t}}{2\pi \cos \theta_i} \int_{-\infty}^{\infty} R \mathbf{A}_i^{(1)} \Phi_i(k_x) \\ &\times \exp\{ik_x[(x + h \operatorname{tg} \theta_i) + p_r^{(1)}y - p_i^{(1)}h]\} dk_x, \end{aligned} \quad (1.92)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_1^{(1)}(\mathbf{r}, t) &= \frac{C e^{-i\omega t}}{2\pi \cos \theta_i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{b_1^{(1)}}{b_i^{(1)}} \mathbf{A}_i^{(1)} \Phi_i(k_x) \\ &\times \exp\{ik_x[(x + h \operatorname{tg} \theta_i) + p_1^{(1)}y - p_i^{(1)}h]\} dk_x. \end{aligned} \quad (1.93)$$

W warstwie pole falowe można zapisać jako

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_1^{(1)}(\mathbf{r}, t) &= \frac{C e^{-i\omega t}}{2\pi \cos \theta_i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{b_\alpha^{(1)}}{b_i^{(1)}} \mathbf{A}_i^{(1)} \Phi_i(k_x) \\ &\times \exp\{ik_x[(x + h \operatorname{tg} \theta_i) - p_\alpha^{(1)}d - p_i^{(1)}h]\} dk_x. \end{aligned} \quad (1.94)$$

Zauważmy, że wyrażenie podcałkowe $b_\alpha^{(1)} \exp(-ik_x p_\alpha^{(1)} d) / b_i^{(1)}$ w (1.94) to po prostu wprowadzony powyżej współczynnik wzbudzenia χ_α . Największy wkład do wiązek (1.92) i (1.94) wnoszą fale płaskie z wektorami falowymi k_x mało różniącymi się od K_x , więc wektory polaryzacji $\mathbf{A}_r^{(1)}(k_x)$ i $\mathbf{A}_\alpha^{(1)}(k_x)$ można w przybliżeniu zamienić na $\mathbf{A}_r^{(1)}(K_x)$ i $\mathbf{A}_\alpha^{(1)}(K_x)$ i wynieść je przed całki. Obliczenia amplitud b_α pokazują, że są to gładkie funkcje w otoczeniu punktu k_l i że w pierwszym przybliżeniu mogą być zamienione przez stałe $b_\alpha(K_x)$. Amplitudy $b_i^{(1)}$ i $b_r^{(1)}$ znikają odpowiednio w punktach v_s i v_s^* mało oddalonych od v_l (patrz (1.77)), więc w otoczeniu v_l o rozmiarach szerokości rezonansu określonego wzorem (1.76), we wzorze na współczynnik odbicia R i w mianowniku współczynnika wzmocnienia χ_α należy zamienić amplitudy $b_i^{(1)}$ i $b_r^{(1)}$ przez ich rozkłady (1.78) i (1.79). Zamiana ta prowadzi do rezonansowych struktur R i χ_α , które jednakże pojawiają się tylko w wąskim przedziale rezonansu. Należy to mieć na uwadze, wyliczając całki (1.92) i (1.94). Jeśli dla $K_x = k_l$ szerokość wiązki jest taka, że całkowicie wpada w obszar rezonansowy

$$K_\alpha w > e^{2k_l |p_2|}, \quad (1.95)$$

gdzie $w = w_i / \cos \theta_i$, to można pozostawić nieskończone granice całkowania dla rezonansowych funkcji podcałkowych, gdyż główny wkład do całek pochodzi z obszaru rezonansowego. Oprócz tego, wszystkie nieharmoniczne składowe w całce (1.94), ze względu na wąski przedział efektywnego obszaru całkowania, zamieniamy na ich wartość w punkcie $k_x = K_x$.

Istotnie nowym wyrażeniem, określającym intensywność wiązki odbitej w płaszczyźnie $y = \text{const}$, wystarczająco oddalonej od płaszczyzny kontaktu aby można było zaniedbać wkład fal powierzchniowych, zgodnie z [5] jest

$$\frac{|\mathbf{u}_r^{(1)}|^2}{|C \mathbf{A}_r^{(1)}|} = e^{-2X_r^2} \left| 1 - \sqrt{\pi} k_l w \frac{v_l'}{v_R} e^{(\eta - X_r)^2} \text{erfc}(\eta - X_r) \right|^2, \quad (1.96)$$

$$X_r = \frac{x_r}{w_i}, \quad \eta = \frac{k_l w}{2} \frac{v_l'}{v_R} + i \frac{(K_x - k_l)w}{2}. \quad (1.97)$$

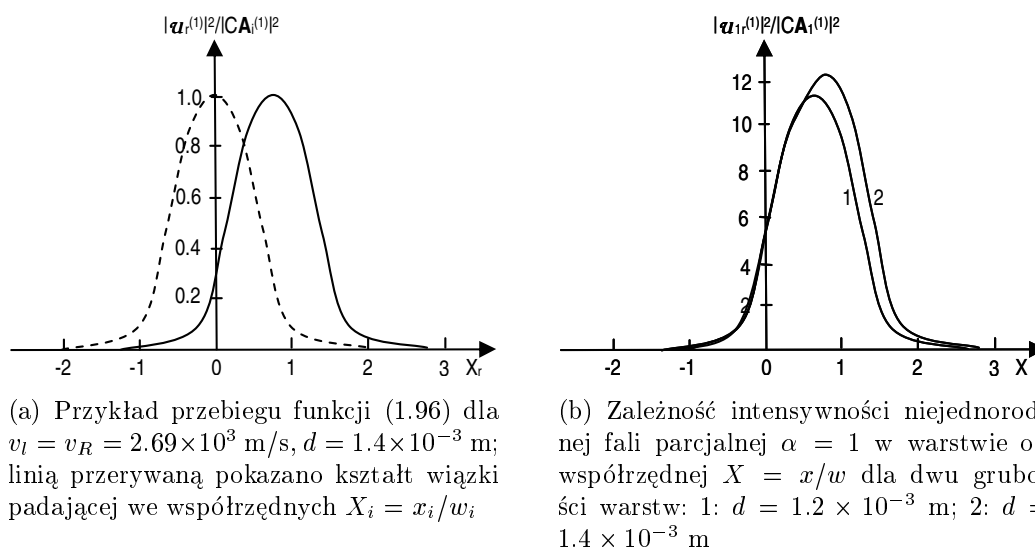
Przykład przebiegu funkcji (1.96) dla struktury składającej się z kryształów kadmu (podłoże) i cynku (warstwa) pokazano na rys. 1.8(a). Jak należało się spodziewać [34], szybka zmiana fazy rezonansowego współczynnika odbicia (1.80) prowadzi do przemieszczenia wiązki odbitej o wielkość, która na podstawie wzoru (1.87) jest o wiele większa od długości fali (efekt Schocha [5], [34]). Końcowy wynik całkowania wyrażenia (1.94) ma następującą postać:

$$\begin{aligned} \frac{|\mathbf{u}_\alpha^{(1)}|^2}{|C \mathbf{A}_\alpha^{(1)}|} &= |\bar{b}_\alpha|^2 e^{-2K_x d(|p_\alpha| - |p_1| - |p_2|)} e^{-2X_r^2} \\ &\times \left| 1 + i \frac{\sqrt{\pi} k_l w}{2} e^{(\eta - X)^2} \text{erfc}(\eta - X) \right|^2, \end{aligned} \quad (1.98)$$

gdzie $X = \frac{x}{w}$, a

$$\bar{b}_\alpha = \frac{b_\alpha}{v_R (\varphi_{i\alpha} \varphi_{45} + \psi_{i5} \psi_{44}) \frac{\partial D(\mathbf{L}_1^*, \mathbf{L}_2^*)}{\partial v}} \Bigg|_{v_R}, \quad \alpha = 1, 2. \quad (1.99)$$

Obliczenia przeprowadzone dla układu kadm - cynk pokazują, że parametry zadania spełniające warunki (1.72) i (1.95) i prowadzące do rezonansowego wzbudzenia fali powierzchniowej w warstwie, są w praktyce osiągalne. Rys. 1.8(b) ukazujący krzywe rezonansowe dane równaniem



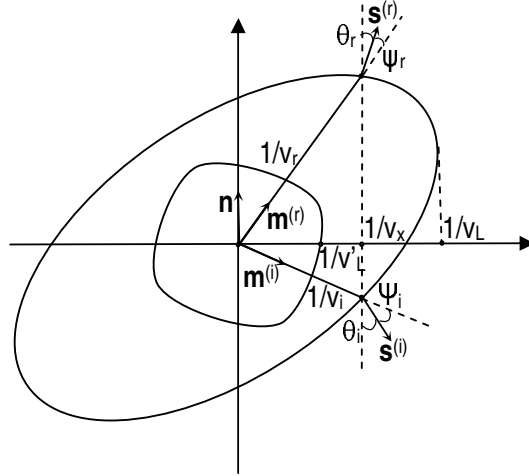
Rys. 1.8. Przesunięcie Schocha ograniczonej wiązki fali akustycznej w warunkach rezonansu dla struktury cynk (warstwa) – kadm (podłoże); $\omega = 7$ Mhz, $w = 10^{-2}$ m, $K_z = k_l$ [7]

(1.98) ($\alpha = 1$) dla dwóch grubości warstwy pokazuje, że dla $\omega = 7$ MHz, $w = 10^{-2}$ m, $d \sim 10^{-3}$ m, intensywność fali powierzchniowej dziesięciokrotnie przewyższa intensywność fali padającej. Należy podkreślić dużą wrażliwość efektu na zmianę parametrów zadania spowodowaną niedużymi zakresami wielkości prowadzącymi do rezonansu i równocześnie spełniającymi warunek (1.72). Współczynnik $|\bar{b}_1|$ w równaniu (1.99) jest rzędu jedności.

1.4. Niesprężyste odbicie wiązki fal akustycznych od swobodnej granicy kryształu

Jak już wspomnieliśmy uprzednio, wiązkę fal akustycznych można przedstawić jako paczkę fal płaskich. Zadanie odbicia wiązki falowej od powierzchni możemy więc sprowadzić do następującej procedury: rozłożyć wiązkę na fale płaskie, przeanalizować odbicie fali płaskiej od powierzchni, a następnie zbudować wiązkę odbitą z odbitych fal płaskich biorących

udział w tym procesie. Jeśli pozostaniemy w liniowym przybliżeniu teorii sprężystości, to jak pokazano w pracach [13] i [50], odbicie płaskiej fali objętościowej o wektorze polaryzacji $\mathbf{A}^{(i)}$ i prędkości fazowej v_i od swobodnej powierzchni półnieskończonego kryształu w pierwszym międzydzielkowym przedziale prędkości $v'_L < v_x < v_L$, gdzie $1/v_x = [\sin(\theta_i + \psi_i)]/v_i$ (rys. 1.9), można przedstawić w postaci fali czteroparcjalnej



Rys. 1.9. Przekrój płaszczyzną padania obszarów załamania objętościowych fal sprężystych

$$\mathbf{U}(\mathbf{r}, t) = g \sum_{j=1}^4 b_j \mathbf{A}^{(j)} e^{ik_x(x+p_j y - v_x t)}, \quad (1.100)$$

gdzie g – stała, określona przez wielkość amplitudy fali padającej, $j = \alpha_1, \alpha_2, i, r$ – indeksy, gdzie α_1 i α_2 odpowiadają składowym powierzchniowym, a i i r objętościowym składowym odpowiednio fali padającej i odbitej, $p_j = k_y^{(j)}/k_x$, $\omega = k_x v_x$. Współczynniki b_j określamy z warunków brzegowych na swobodnej powierzchni

$$c_{pqst} u_{s,t} n_q |_{y=0} = ik g \sum_{j=1}^4 b_j L_p^{(j)} e^{ik_x(x - v_x t)} = 0, \quad (1.101)$$

gdzie c_{pqst} – tensor modułów sprężystości, $\mathbf{L}^{(j)}$ – amplituda siły na powierzchni odpowiadająca j -ej fali parcjalnej. Zgodnie z [13], rozwiązaniem równania

$$b_{\alpha_1} \mathbf{L}^{(\alpha_1)} + b_{\alpha_2} \mathbf{L}^{(\alpha_2)} + b_i \mathbf{L}^{(i)} + b_r \mathbf{L}^{(r)} = 0, \quad (1.102)$$

jest wektorowy iloczyn mieszany

$$b_j = [\mathbf{L}^{(j)} \mathbf{L}^{(\alpha_1)*} \mathbf{L}^{(\alpha_2)*}], \quad (1.103)$$

gdzie $*$ – sprzężenie zespolone. Wektory $\mathbf{L}^{(j)}$ są związane z wektorami $\mathbf{A}^{(j)}$ warunkiem unormowania

$$\mathbf{A}^{(j)} \mathbf{L}^{(k)} + \mathbf{A}^{(k)} \mathbf{L}^{(j)} = \delta_{jk}. \quad (1.104)$$

Dla pewnych orientacji płaszczyzny padania rozwiązanie (1.100) może dla określonej prędkości $v_x = v_R$ rozpaść się na dwa niezależne rozwiązania, opisujące dwuparcjalne fale: objętościową i powierzchniową. Dla kątów padania różniących się niezbyt dużo od owego wyróżnionego kąta φ_0 , rozwiązanie dla fali powierzchniowej przechodzi na gałąź fal odciekających $v_l(\varphi)$, gdzie $v_l(\varphi_0) = v_R$, czyli prędkości fal Rayleigha. Formalizm matematyczny pozwalający na otrzymanie takich rozwiązań polega na dodaniu do dwu parcjalnych fal powierzchniowych objętościowej fali odbitej z amplitudą b_r , małą według małości miary odchylenia $\Delta\varphi$ kąta padania od kąta granicznego φ_0 . Warunki graniczne w tej nowej sytuacji przyjmują postać

$$b_{\alpha_1} \mathbf{L}^{(\alpha_1)} + b_{\alpha_2} \mathbf{L}^{(\alpha_2)} + b_r \mathbf{L}^{(r)} = 0, \quad (1.105)$$

czyli

$$q_r \equiv [\mathbf{L}^{(r)} \mathbf{L}^{(\alpha_1)} \mathbf{L}^{(\alpha_2)}] = 0, \quad (1.106)$$

a spełnia je fala odciekająca z zespoloną wartością prędkości fazowej $v_l - i v_l'$, gdzie urojony składnik

$$v_l' \approx \eta(\Delta\varphi)^2, \quad \eta > 0, \quad (1.107)$$

określa tłumienie amplitudy fali wzdłuż powierzchni i odciekanie energii w głąb kryształu [13].

Postępując zgodnie z metodologią pokazaną w pracy [13] można pokazać, że współczynniki b_j (1.103) w otoczeniu v_R przyjmują postać

$$b_i(v_x) \approx B_i v_i' \left(1 - i \frac{\Delta v}{v_i'}\right), \quad b_r(v_x) \approx B_r v_i' \left(1 - i \frac{\Delta v}{v_i'}\right), \quad (1.108)$$

$$b_\alpha(v_x) \approx C_\alpha \Delta\varphi + D_\alpha \Delta v, \quad \alpha = \alpha_1, \alpha_2,$$

gdzie

$$B_j \equiv i \frac{\partial q_j^*}{\partial v} \Big|_{v_R}, \quad j = i, r, \quad C_\alpha \equiv \frac{db_\alpha}{d\varphi} \Big|_{\varphi_0}, \quad D_\alpha \equiv \frac{\partial b_\alpha}{\partial v} \Big|_{v_R}. \quad (1.109)$$

Tutaj q_i określamy zgodnie ze wzorem (1.106), uprzednio zamieniwszy indeks r na i , b_α dane jest wzorem (1.103), $\frac{d}{d\varphi} = \frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\partial v_i}{\partial\varphi} \frac{\partial}{\partial v}$, $\Delta v = v_x - v_l$.

Oznaczmy odpowiednie współczynniki odbicia

$$R = \frac{b_r}{b_i}, \quad R_\alpha = \frac{b_\alpha}{b_i}. \quad (1.110)$$

Zauważmy, że $|R| = 1$, gdyż z prawa zachowania energii wynika, iż $b_r b_r^* = b_i b_i^*$. Wykorzystując (1.108), otrzymujemy dla R

$$R(k_x) = e^{i[\chi_0 + \chi(k_x)]}, \quad (1.111)$$

gdzie

$$e^{i\chi_0} = \frac{B_r}{B_i} \frac{1 - i\beta}{1 + i\beta}, \quad (1.112)$$

$$e^{i\chi(k_x)} = \frac{k_x - k_p^*}{k_x - k_p}, \quad (1.113)$$

$$\beta \equiv \frac{v_l}{v_l'} \gg 1, \quad k_p \equiv k_i(1 + i/\beta), \quad k_l = \frac{\omega}{v_l}. \quad (1.114)$$

Wynika stąd, że

$$\chi(k_x) = 2 \operatorname{arccctg} \frac{\beta(k_x - k_l)}{k_l}, \quad (1.115)$$

czyli faza współczynnika odbicia silnie zmienia się w otoczeniu punktu k_l o promieniu $\sim k_l/\beta$.

Dla R_α mamy

$$R_\alpha = N_\alpha + \frac{M_\alpha}{\sqrt{\beta}} \frac{k_x}{k_x - k_p}, \quad (1.116)$$

gdzie

$$N_\alpha = i \frac{D_\alpha}{B_i}, \quad M_\alpha = -i \frac{(\operatorname{sign} \Delta\varphi) C_\alpha}{\sqrt{v_i \eta} B_i}. \quad (1.117)$$

Amplituda drugiego składnika we współczynniku R_α ma w punkcie k_i ostry pik o wysokości $\sim \sqrt{\beta}$ i o szerokości $\sim 1/\sqrt{\beta}$, przechodzący dla $\Delta\varphi \rightarrow \infty$ w funkcję δ . W otoczeniu punktu k_i zarówno faza R_α jak i faza R zmieniają się bardzo szybko.

Tak więc, zgodnie z [34], dla odpowiednich kątów padania należy oczekiwać zmiany kształtu wiązki odbitej oraz jej przemieszczenia względem położenia określonego prawami tradycyjnej akustyki geometrycznej. Wielkość tego zjawiska zależy od parametru β . Wkład do końcowego efektu dają zarówno fale objętościowe jak i powierzchniowe, ale ich wpływ jest różny.

Podobną sytuację obserwujemy przy odbiciu wiązek akustycznych w płynach od granicy ciała stałego [30], a także przy odbiciu wiązek optycznych w strukturach wielowarstwowych [140]. Analogiczna do naszych równań (1.111) i (1.113), jest również postać równań w otoczeniu punktu osobliwego k_p (traktowanego tu jako pewien parametr fenomenologiczny). Tak więc otrzymane poniżej równania (1.126) i (1.129) będą formalnie wyglądać jak te, otrzymane w pracach Tamira i Bertoniego [30] i [140].

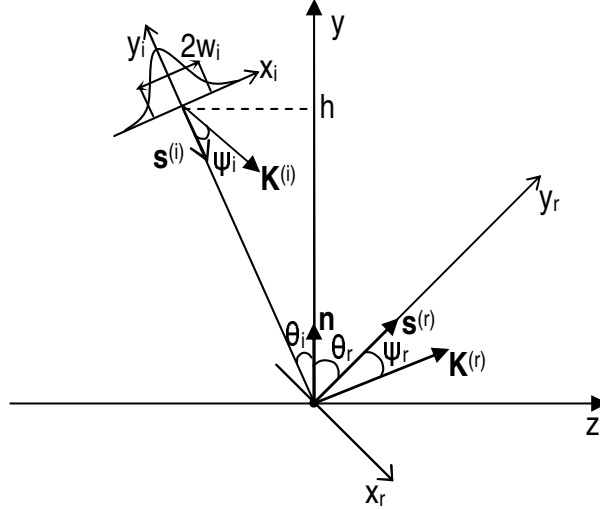
Powyżej zakładaliśmy, że $k_x > 0$. Jeśli jednak byłoby tak, że $k_x < 0$, to w wyrażeniu (1.100) należy położyć $\omega = -k_x v_x$ i wtedy we wzorach (1.113) i (1.116) powinno się zamienić k_x na $|k_x|$. Pojawiający się przy tej okazji biegun $k_x = -k_p$ powinien, podobnie jak w przypadku granicy płyn – ciało stałe [113], doprowadzić do pojawienia się tzw. powrotnego odbicia wiązki, gdy część energii odbija się od granicy pod kątem θ_R na spotkanie z wiązką padającą. Jednakże intensywność tej wstecznej wiązki zazwyczaj jest pomijalnie mała, w szczególności dla rozpatrywanych poniżej wiązek o profilu gaussowskim [114], [117] i [137], więc tego efektu nie będziemy tu uwzględniać.

Rozpatrzmy dwuwymiarową ograniczoną wiązkę fali akustycznej o profilu gaussowskim, padającym w płaszczyźnie xy na powierzchnię kryształu $y = 0$ pod kątem θ_i do normalnej \mathbf{n} (rys. 1.10). Pole przemieszczeń przedstawiamy w postaci

$$\mathbf{U}^{(i)}(\mathbf{r}, t) = C\mathbf{A}^{(i)} \exp\left[-\left(\frac{x_i}{w_i}\right)^2 + i(\mathbf{K}^{(i)}\mathbf{r}^{(i)} - \omega t)\right], \quad (1.118)$$

gdzie $\mathbf{r}^{(i)}$ – promień wodzący w układzie współrzędnych $x_i y_i$, $\mathbf{A}^{(i)}$ – polaryzacja fali płaskiej z wektorem falowym $\mathbf{K}^{(i)} = \mathbf{m}^{(i)}\omega/v_i$. Wielkości $\mathbf{A}^{(i)}$ i v_i określa się z równania Christoffela dla $\mathbf{m}^{(i)}$ – wektora normal-

nego do powierzchni falowej [50]. Wiązka (1.118) propaguje się wzdłuż wektora prędkości grupowej tej fali $\mathbf{s}^{(i)}$, a jego połowa szerokości w_i jest wystarczająco duża w porównaniu z długością fali: $K^{(i)} w_i \gg 1$.



Rys. 1.10. Geometria zadania odbicie wiązki fali akustycznej

Wyrażenie (1.118) można łatwo otrzymać wykorzystując rozkład Fouriera na fale płaskie oraz warunek brzegowy definiujący postać rozkładu Gaussa amplitudy wzdłuż płaszczyzny $\mathbf{K}^{(i)} \mathbf{r} = 0$ i umożliwiający odtworzenie kształtu wiązki. Fazę określa się z warunku, by wiązka spełniała równanie falowe (1.100). Największy wkład do wiązki (1.118) wnoszą fale płaskie z wektorami falowymi \mathbf{k} mało różniącymi się od $\mathbf{K}^{(i)}$. Można więc zastosować przybliżenie, że wszystkie cząstkowe fale płaskie paczki falowej mają identyczną polaryzację $\mathbf{A}^{(i)}$ oraz wykorzystać do otrzymania wzoru (1.118) rozkład Fresnela:

$$k_y \equiv p_i k_x = \sqrt{k^2 - k_x^2} \approx -K^{(i)} \cos(\theta_i + \psi_i) + \operatorname{tg} \theta_i [k_x - K^{(i)} \sin(\theta_i + \psi_i)]. \quad (1.119)$$

Tak więc reprezentacja padającej wiązki fal akustycznych przyjmuje postać

$$\mathbf{U}^{(i)} = C \frac{\mathbf{A}^{(i)}}{2\pi \cos \theta_i} \int_{-\infty}^{\infty} dk_x \Phi_i(k_x) e^{ik_x [(x+h \operatorname{tg} \theta_i) + p_i (y-h) - v_x t]}, \quad (1.120)$$

gdzie

$$\Phi_i(k_x) = \sqrt{\pi} w_i \exp\left(-\frac{w_i^2}{4 \cos^2 \theta_i} [k_x - K^{(i)} \sin(\theta_i + \psi_i)]\right), \quad (1.121)$$

a p_i można wyznaczyć ze wzoru (1.119). Zauważmy, że uwzględnienie we wzorze (1.119) kolejnych wyrazów jest równoważne uwzględnieniu dyfrakcyjnego rozmycia wiązki i doprowadziłoby do pojawienia się urojonego dodatku do półszerokości wiązki w_i .

$$\begin{aligned} \mathbf{U}(\mathbf{r}, t) = & \frac{1}{2\pi \cos \theta_i} \int_{-\infty}^{\infty} dk_x e^{ik_x[(x+h \operatorname{tg} \theta_i) - p_i h - v_x t]} \times \\ & \times g(k_x) \sum_j b_j(k_x) A^{(j)} e^{ik_x p_j y}. \end{aligned} \quad (1.122)$$

$$g(k_x) = C \frac{\Phi_i(k_x)}{b_i(k_x)}. \quad (1.123)$$

$$\mathbf{U}^{(r)} = \frac{C}{2\pi \cos \theta_i} \int_{-\infty}^{\infty} dk_x R \mathbf{A}^{(i)} e^{ik_x[(x+h \operatorname{tg} \theta_i) + p_r y - p_i h - v_x t]}, \quad (1.124)$$

$$\mathbf{U}^{(\alpha)} = \frac{C}{2\pi \cos \theta_i} \int_{-\infty}^{\infty} dk_x R \mathbf{A}^{(\alpha)} e^{ik_x[(x+h \operatorname{tg} \theta_i) + p_\alpha y - p_i h - v_x t]}, \quad (1.125)$$

gdzie R określa się ze wzorów (1.111) – (1.113), R_α – ze wzorów (1.116) i (1.117), Φ_i – z (1.121), a p_i – z (1.119).

1.4.1. Przemieszczenie wiązki i jej kształt w położeniu oddalonym od powierzchni

Jeśli kierunek wiązki odbitej $\mathbf{U}^{(r)}$, wynikający z warunku $K^{(r)} \sin(\theta_r + \psi_r) = K^{(i)} \sin(\theta_i + \psi_i)$ (porównaj rys. 1.10) wynosi $\mathbf{K}^{(r)} = \mathbf{m}^{(r)} \omega / v_r$ i jest odległy od kierunku osi akustycznej, to $\mathbf{A}^{(r)}$ w wyrażeniu podcałkowym (1.124) można przybliżyć przez wektor polaryzacji fali płaskiej z normalną falową $\mathbf{m}^{(r)}$. Anizotropowy rozkład Fresnela dla p_r ma z dokładnością do znaku postać analogiczną do wyrażenia (1.119) i z zamianą wszystkich indeksów z i na r . W wyniku otrzymujemy

$$\mathbf{U}^{(r)} = \mathbf{U}_0^{(r)} [1 - 2\sqrt{\pi} \kappa e^{(\gamma - X_r)^2} \operatorname{erfc}(\gamma - X_r)], \quad (1.126)$$

gdzie wprowadziliśmy następujące oznaczenia:

$$\mathbf{U}_0^{(r)} = C \mathbf{A}^{(r)} \exp\{-X_r^2 + i[\chi_0 + \mathbf{K}^{(r)} \mathbf{r}^{(i)} + h(K_y^{(r)} - K_y^{(i)}) - \omega t]\}, \quad (1.127)$$

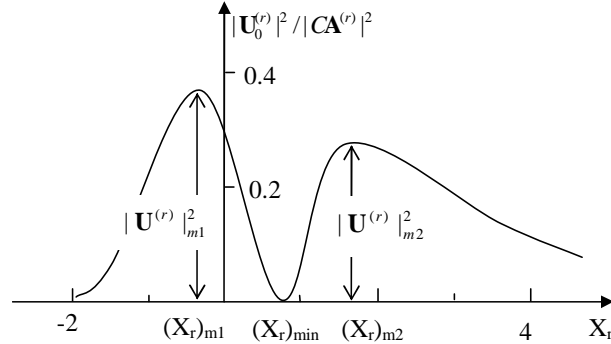
$$\begin{aligned} \kappa &= \frac{k_i w}{2\beta}, \quad X_r = \frac{x_r}{w_r}, \quad w = \frac{w_r}{\cos \theta_r} = \frac{w_i}{\cos \theta_i}, \\ \gamma &= \kappa + i\mu, \quad \mu = \Delta k \frac{w}{2} = [K^{(i)} \sin(\theta_i + \psi_i) - k_i] \frac{w}{2}. \end{aligned} \quad (1.128)$$

W przypadku izotropii $v' = 0$, a w konsekwencji również $\kappa \sim \beta^{-1} = 0$ i $\mathbf{U}(r) = \mathbf{U}_0^{(r)}$, czyli omawiany efekt nie występuje. Z tego samego powodu, w sytuacji gdy $\Delta\varphi = 0$ ($\kappa = 0$), zjawisko nie występuje również w przypadku anizotropii.

Wyrażenie

$$\frac{|\mathbf{U}(r)|^2}{C \mathbf{A}^{(r)}} = e^{-2X_r} |1 - 2\sqrt{\pi} \kappa e^{(\gamma - X_r)} \operatorname{erfc}(\gamma - X_r)|^2, \quad (1.129)$$

opisuje intensywność wiązki odbitej na płaszczyźnie $y_r = y_0 = \text{const}$, gdzie wielkość y_0 jest na tyle duża, by można było pominąć wkład fal powierzchniowych. Wyrażenie to jest parzyste względem μ (a więc i Δk).



Rys. 1.11. Zależność intensywności wiązki odbitej $|\mathbf{U}^{(r)}|^2$ od współrzędnej X_r dla $\kappa = 0.15$, $\Delta k = 0$ [5]

Charakterystyczny przebieg zależności $|\mathbf{U}^{(r)}|^2$ od X_r pokazany jest na rys. 1.11 dla $\kappa = 0.15$ i $\Delta k = 0$. Współrzędna drugiego maksimum to wielkość boczego przemieszczenia wiązki odbitej – analog efektu Schocha.

Rozpatrzmy asymptotyczne zachowanie funkcji $|\mathbf{U}^{(r)}|^2$ dla $|\gamma| = (\kappa^2 + \mu^2) \ll 1$ oraz dla $|\gamma| \gg 1$. Parametr $\kappa = k_l/2\beta$ może przyjmować zarówno duże jak i małe wartości w zależności od stosunku dwu dużych wielkości $k_l w$ i $\beta \sim (\Delta)^{-2}$. Przypomnijmy, że przy przybliżonym wyliczaniu współczynników R we wzorach (1.111) – (1.113) i R_α w (1.116) założyliśmy, iż zarówno $\Delta\varphi$, jak i $|\Delta k|/k_l$, są małe.

Dla $|\gamma| \ll 1$ (i zaniedbując we wzorze dla $(X_r)_{m1}$ człony w wyższych potęgach $\sim \kappa^2 \mu^2$) oraz $\sim \kappa \mu^2$, otrzymujemy

$$(X_r)_{m1} \approx 2\kappa(1 - \kappa\sqrt{\pi}), \quad (X_r)_{min} \approx \sqrt{\ln\left(\frac{1}{4\kappa\sqrt{\pi}}\right) + \kappa},$$

$$(X_r)_{m2} \approx \sqrt{\ln\frac{\lambda + 3\kappa + \mu^2\lambda(1 - 2\lambda^2)}{4\kappa^2\sqrt{\pi}}} + \kappa,$$
(1.130)

gdzie λ – wielkość rzędu jedności (porównaj rys. 1.12).

Dla $|\gamma| \gg 1$ (i dla κ lub $|\mu| \gg 1$) otrzymujemy

$$(X_r)_{m2} \approx \frac{\kappa}{\kappa^2 + \mu^2}.$$
(1.131)

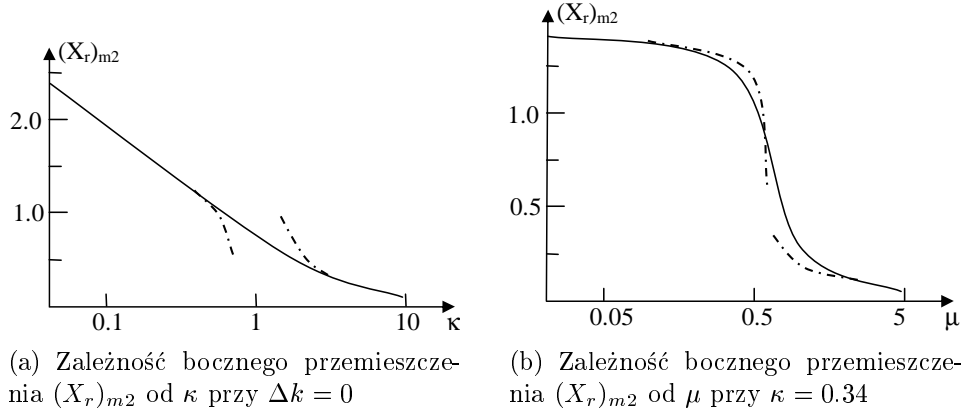
Jeśli zaś $|\gamma| \gg 1$ oraz $\kappa \gg |\mu|$, to

$$(X_r)_{m1} \approx -\kappa - \frac{2\kappa}{8\kappa^2 + 1}, \quad (X_r)_{min} \approx -\kappa + \frac{2\kappa}{8\kappa^2 + 1},$$
(1.132)

jednakże wraz ze wzrostem $|\mu|$ oba te ekstrema znikają i wyrażenie $|\mathbf{U}^{(r)}(X_r)|^2$ ma tylko jedno maksimum w punkcie $(X_r)_m = (X_r)_{m2}$ ze współrzędną (1.131). Na rys. 1.12 pokazano zestawienie wyników otrzymanych na podstawie obliczeń komputerowych i ze wzorów analitycznych (1.130) i (1.131) boczego przemieszczenia $(X_r)_{m2}$. Widać, że otrzymane przybliżenia odbiegają od wyników dokładnych tylko dla wąskiego przedziału wartości κ i μ . Dla ekstremalnych wartości funkcji $|\mathbf{U}^{(r)}|^2$ można otrzymać dokładne wyrażenie

$$\frac{|\mathbf{U}^{(r)}|_{extr}^2}{|C\mathbf{A}^{(r)}|^2} = e^{-2(X_r)^2} \Re e\left\{(\gamma + X_r) \times \right.$$

$$\left. \times [2\sqrt{\pi} e^{(\gamma - X_r)^2} \operatorname{erfc}(\gamma - X_r) - \frac{1}{\kappa}] \right\} \Big|_{X_r=(X_r)_{extr}}.$$
(1.133)



Rys. 1.12. Linia ciągłą oznaczono wyniki dokładnych obliczeń, a liniami przerywanymi zależności wynikające ze wzoru (1.130) (a) i (1.131) (b); w przypadku (a): $\lambda = \{\ln[(\lambda' + 2\kappa)/4\kappa^2\sqrt{\pi}]\}^{1/2}$, $\lambda' \approx 2.1$; w przypadku (b): $\lambda = 1.16$; osie zmiennych niezależnych są w skali logarytmicznej [5]

Dla $\Delta\kappa = 0$ wyrażenie to daje $|\mathbf{U}^{(r)}|_{min} = 0$ oraz

$$\frac{|\mathbf{U}^{(r)}|_{m1,2}^2}{|C\mathbf{A}^{(r)}|^2} = e^{-2(X_r)_{m1,2}^2} \{[\kappa + (X_r)_{m1,2}]/\kappa\}^2. \quad (1.134)$$

Podstawiając tu wzory (1.130)–(1.132) można otrzymać oszacowania dla $|\mathbf{U}^{(r)}|_{ekst}^2$ dla dużych i małych κ i μ .

Okazuje się, że przy $\Delta\varphi \neq 0$ ($\kappa \neq 0$) wraz ze wzrostem $|\gamma|$ zachodzi zmiana rozkładu intensywności między dwoma maksimumami. Pierwsze maksimum, przesunięte z punktu $X_r = 0$ na lewo, zmniejsza się, a dla dostatecznie dużych wartości $|\mu|$ znika. Drugie maksimum zbliża się z prawej strony do punktu $X_r = 0$ zwiększając swą wysokość: wielkość $|\mathbf{U}^{(r)}|_{m2}^2/|C\mathbf{A}^{(r)}|^2 \sim (\Delta\varphi)^4$ przy $|\gamma| \ll 1$ i asymptotycznie zdąża do jedności dla $|\gamma| \gg 1^5$. Zauważmy, że dla $|\gamma| \gg 1$ rozkład intensywności $|\mathbf{U}^{(r)}(X_r)|^2$ praktycznie ma dla $|\mu| \ll 1$ tylko jedno maksimum. Rzeczywiście, na przykład przy $\Delta k = 0$ dla κ zmieniającego się od 0 do 1, wielkość $|\mathbf{U}^{(r)}|_{m1}^2/|C\mathbf{A}^{(r)}|^2$ zmniejsza się od 1 do $\sim 10^{-2}$, a $|\mathbf{U}^{(r)}|_{m2}^2/|C\mathbf{A}^{(r)}|^2$ wzrasta od 0 do wielkości rzędu 1.

⁵ Przy określonym $\Delta\varphi$ (czyli κ), w zgodzie z powyższymi wzorami, wielkość $|\mathbf{U}^{(r)}|_{m2}^2$ wraz ze wzrostem $|\mu|$ od zera początkowo zmniejsza się dopóki $|\mu| \ll 1$, a następnie wzrasta.

Tak więc, rezonansowe zachowanie się wiązki odbitej o określonej szerokości i częstotliwości definiowane jest przez dwa podstawowe fizyczne parametry: $\Delta\varphi$ i Δk . W pobliżu bieguna współczynnika odbicia (1.113), odpowiadającego modzie odciekającej, boczne przemieszczenie wiązki odbitej osiąga wartości rzędu szerokości wiązki $(x_r)_{m2} = w(X_r)_{m2} \sim w$ (porównaj (1.130)). Zmiana parametrów $\delta\varphi$ lub Δk zmniejsza to przemieszczenie zgodnie ze wzorem (1.131): przemieszczenie wiązki staje się o wiele mniejsze od szerokości wiązki.

Rozpatrzmy teraz zależność bocznego przemieszczenia wiązki $(x_r)_{m2}$ od w dla zadanej geometrii, czyli określonych $\Delta\varphi \neq 0$ i Δk . Dla małych w ($|\gamma| \ll 1$, tak jak poprzednio $k_l w \gg 1$) przesunięcie wiązki jest proporcjonalne do w , a dla większych w ($|\gamma| \gg 1$) wielkość przesunięcia przechodzi w plateau $\sim (2\beta/k_l)/[1 + (\beta\Delta k/k_l)^2]$.

1.4.2. Pole falowe na powierzchni

Wkład do sumarycznego pola falowego od powierzchniowych fal płaskich zanika wykładniczo wraz z oddalaniem się od granicy. Wprowadzając bezwymiarową współrzędną $X = x/w$, otrzymujemy dla $\mathbf{U}^{(\alpha)}$ opisanego równaniem (1.125), następujące wyrażenie dla $\mathbf{U}^{(\alpha)}$ na powierzchni $y = 0$:

$$\mathbf{U}^{(\alpha)} = \mathbf{U}_0^\alpha \left[N_\alpha + \frac{M_\alpha}{\sqrt{\beta}} - \sqrt{\pi} M_\alpha \left(\frac{1}{\sqrt{\beta}} - i\sqrt{\beta} \right) \kappa e^{(\gamma-X)^2} \operatorname{erfc}(\gamma - X) \right], \quad (1.135)$$

gdzie

$$\mathbf{U}_0^\alpha = C \mathbf{A}^\alpha \exp[-X^2 + i(\mathbf{K}^i \mathbf{r}^i|_{y=0} - \omega t)]. \quad (1.136)$$

Natężenie sumarycznego pola falowego $|\mathbf{U}|^2$ na granicy ośrodka jest superpozycją wkładu powierzchniowego i objętościowego

$$\begin{aligned} |\mathbf{U}|^2 &= |\mathbf{U}^{(i)} + \mathbf{U}^{(r)} + \mathbf{U}^{(\alpha_1)} + \mathbf{U}^{(\alpha_2)}|^2 = \\ &= |\mathbf{U}^{(i)} + \mathbf{U}^{(r)}|^2 + |\mathbf{U}^{(\alpha_1)} + \mathbf{U}^{(\alpha_2)}|^2 + \\ &+ 2\Re[(\mathbf{U}^{(i)} + \mathbf{U}^{(r)})(\mathbf{U}^{(\alpha_1)} + \mathbf{U}^{(\alpha_2)})^*]. \end{aligned} \quad (1.137)$$

Dla $\Delta\varphi = 0$ parametr $\beta \sim (\Delta\varphi)^{-2}$ zmierza do nieskończoności, a $\kappa \sim \beta^{-1} = 0$. Z tego względu zależność $|\mathbf{U}(X)|^2/|C\mathbf{A}^{(i)}|^2$ ma postać krzywej Gaussa ze środkiem w punkcie $X = 0$ i z wysokością maksimum rzędu jedności. Zachowanie się pola falowego na granicy wraz ze wzrostem $\Delta\varphi$

i małych $\mu = \Delta k w/2$ w sposób istotny zależy od wielkości parametru $\kappa\beta^{1/2} \sim k_l w \Delta\varphi$. Dla $\kappa\beta^{1/2} \ll 1$, $|\mu| \ll 1$ środkowe maksimum przesuwa się z punktu $X = 0$ (przesunięcie może nastąpić albo w lewo albo w prawo) na odległość rzędu $\kappa\beta^{1/2}$, a jego wysokość zmienia się niewiele. Równocześnie prawa strona tego maksimum rośnie wraz ze wzrostem $\Delta\varphi$, tak że dla $X \gtrsim 1$ mamy $|\mathbf{U}(X)|^2/|C\mathbf{A}^{(i)}|^2 \sim \kappa^2\beta \exp(-i\kappa X)$. Przy spełnieniu określonych warunków na stosunek pomiędzy mnożnikami amplitud fal dla prawego maksimum może pojawić się drugie maksimum oddzielone niegłębokim minimum i przemieszczające się ze strony prawej na lewą wraz ze wzrostem $\Delta\varphi$. Wraz z dalszym wzrostem $\Delta\varphi$, gdy spełniony jest warunek

$$1 \ll \frac{1}{2\sqrt{\pi}\kappa} \ll e^{\kappa^2\beta}, \quad (1.138)$$

drugie maksimum zaczyna górować nad pierwszym i ostatecznie funkcja $|\mathbf{U}(x)|^2$ deformuje się do jednego maksimum spełniającego równania

$$\begin{aligned} X_m &\approx \sqrt{\ln \frac{1}{2\sqrt{\pi}\kappa}} + \kappa, \\ \frac{|\mathbf{U}_m|^2}{|C\mathbf{A}^{(i)}|^2} &\approx \zeta\beta e^{-2X_m^2} \sim 4\pi\zeta\kappa^2\beta, \end{aligned} \quad (1.139)$$

gdzie

$$\zeta = \frac{|\mathbf{A}^{(\alpha_1)}\mathbf{M}_{(\alpha_1)} + \mathbf{A}^{(\alpha_2)}\mathbf{M}_{(\alpha_2)}|^2}{|\mathbf{A}^{(i)}|^2}. \quad (1.140)$$

Zależność X_m i $|\mathbf{U}_m|^2$ od μ ($|\mu| \ll 1$) opisywane jest przez składniki będące małymi poprawkami do wyrażenia (1.139). Na przykład, przy warunku $1/\kappa\sqrt{\beta} \ll \mu^2 \ll 1$ mamy

$$X_m \approx \sqrt{\ln \frac{1 - 2\mu^2\lambda^2}{2\sqrt{\pi}\kappa}} + \kappa, \quad (1.141)$$

gdzie jak poprzednio $\lambda \sim 1$. Zauważmy, że dla $\mu^2 \lesssim 1/\kappa\sqrt{\beta}$, $|\mu| \ll 1$ w pierwszym rzędzie małości pojawiają się poprawki liniowe względem μ (jawna postać tych wyrażen jest dosyć skomplikowana). W konsekwencji, rozkład natężenia pola falowego na granicy, w odróżnieniu od sytuacji we wnętrzu kryształu, zależy od znaku μ , czyli od znaku Δk .

Omawiany powyżej przypadek, gdy natężenie $|\mathbf{U}|^2$ przy $\kappa\sqrt{\beta} \ll 1$, $|\mu| \ll 1$ charakteryzuje się przez dwa maksima, ma miejsce na przykład w ośrodkach poprzecznie izotropowych. Możliwy jest również inny wariant, gdy drugie maksimum nie pojawia się. Przy tym główne maksimum wraz ze wzrostem $\Delta\varphi$ od zera przesuwa się z punktu $X = 0$ na prawo. Jednakże kierunek ruchu maksimum wraz ze wzrostem $\Delta\varphi$ zmienia się na przeciwny, gdy parametr $\kappa\sqrt{\beta}$ osiąga wartość rzędu jedności i przy warunku (1.138) (i $|\mu| \ll 1$) dane maksimum także opisywane jest przez wyrażenie (1.139). Jeśli będziemy dalej zwiększać $\Delta\varphi$, to parametr $2\sqrt{\pi}\kappa$ będzie już mały i wielkość $|\mathbf{U}|_m^2$ zacznie się zmniejszać. Dla $\kappa \gg 1$, $\kappa \gtrsim |\mu|$ dla badanego maksimum zachodzą relacje

$$X_m \approx \frac{\kappa}{2(\kappa^2 + \mu^2)}, \quad \frac{|\mathbf{U}|_m^2}{|C\mathbf{A}^{(i)}|^2} \approx \zeta\beta, \quad (1.142)$$

gdzie $\beta \sim 1/(\Delta\varphi)^2 \gg 1$. Tak więc, dla dowolnych stosunków między mnożnikami przy amplitudach fal, zależność $|\mathbf{U}(X)|^2$ dla odpowiednio dużych wartości $\kappa\sqrt{\beta}$ jest „jednorodna”, przy czym maksimum dane jest wzorami (1.139) i (1.142). Należy podkreślić, że maksimum (1.139), (1.142) w pełni jest określone przez wkład pochodzący od fali powierzchniowej

$$\frac{|\mathbf{U}|_m^2}{|C\mathbf{A}^{(i)}|^2} \approx \frac{|\mathbf{U}^{\alpha_1} + \mathbf{U}^{\alpha_2}|_m^2}{|C\mathbf{A}^{(i)}|^2} \gg 1, \quad \text{dla } \kappa\sqrt{\beta} \gg 1,$$

i znacznie przewyższa natężenie wiązki padającej i odbitej wewnątrz kryształu.

Rozpatrzmy teraz rozkład natężenia $|\mathbf{U}|^2$ na granicy w zależności od szerokości wiązki przy zadanej geometrii (przy ustalonych $\Delta\varphi \neq 0$ i $|\Delta k|$). Dla małych w , takich że $|\gamma| \ll 1$, ale $2\sqrt{\pi}\kappa e \kappa^2\beta \gg 1$, rozkład ten ma jedno maksimum (1.139) o wysokości $\sim w^2$ i bocznym przemieszczeniem $x_m = wX_m$, czyli proporcjonalnym do w . Dla dużych w , spełniających warunek $|\gamma| \gg 1$, ale tak, że $k_l/\beta \gtrsim |\Delta k|$, wysokość i współrzędna x_m danego maksimum zdąża do wartości (1.142), nie zależącej od w .

Jeśli przy ustalonych parametrach $|\Delta\varphi|$ i w zwiększać odchylenie kierunku padania wiązki od kierunku rezonansowego, czyli zwiększać $|\Delta k|$, to dla dopuszczalnych granicznie w naszej analizie wielkości $|\Delta k|$: $|\Delta k|w \gg 1$ i $|\Delta k| \gg k_l/\sqrt{\beta}$ – wysokość maksimum $|\mathbf{U}|_m^2/|C\mathbf{A}^{(i)}|^2$ zdąża do pewnej stałej wielkości rzędu jedności, a jego współrzędna x_m maleje jak

$k_l/\sqrt{\beta} (\Delta k)^2$, czyli $\sqrt{\beta}$ razy wolniej od bocznego przemieszczenia maksimum wiązki odbitej wewnątrz kryształu (dla ośrodka poprzecznie izotropowego zachodzi związek (1.145)).

1.4.3. Ośrodek poprzecznie izotropowy

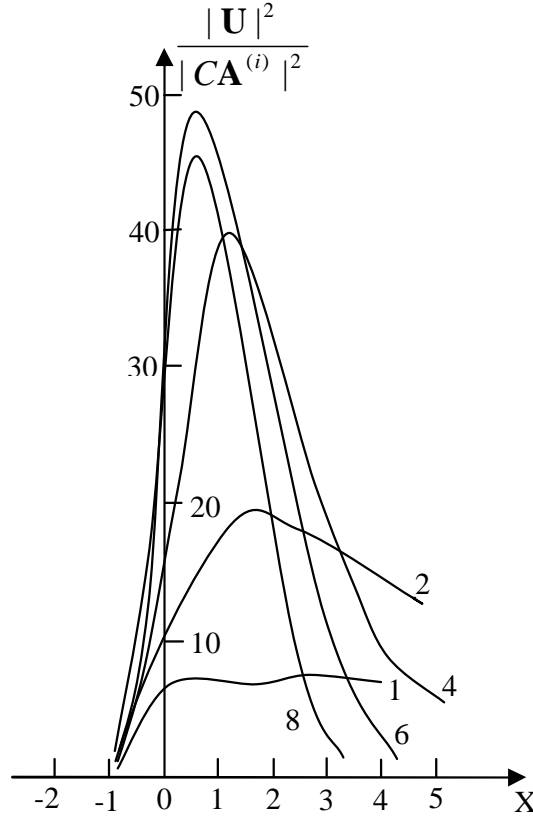
Rozpatrzmy ośrodek poprzecznie izotropowy, czyli o heksagonalnej strukturze krystalicznej z osią sześciokrotnej symetrii leżącej w płaszczyźnie granicznej ciała i próżni. Zagadnienie odbicia fal płaskich w tym zagadnieniu zostało szczegółowo przedstawione w pracy [13]. W szczególności, dla orientacji φ_0 płaszczyzny padania prostopadłej do osi 6-ego rzędu pokazano, że przy stosunku stałych sprężystości $c_{66} > c_{44}$ w przedziale prędkości $v_L < v_x < v'_L$ (rys. 1.9) istnieje taki punkt v_R , w którym istnieje dwuparcjalne rozwiązanie powierzchniowe. Zgodnie z ogólną teorią przez ten punkt przechodzi gałąź fal odciekających $v_l(\varphi)$.

Rozwiązania w postaci fal płaskich w kryształach heksagonalnych charakteryzują się szeregiem osobliwości. Po pierwsze, dla $c_{66} > c_{44}$ rozwiązanie (1.100) dla orientacji φ_0 w całym przedziale $v_L < v_x < v'_L$ realizuje się w postaci dwuparcjalnej fali objętościowej, odpowiadającej czystemu odbiciu [13]. W konsekwencji mamy $(\partial b_\alpha / \partial v)_{v_R} = 0$ i $N_\alpha = 0$. Wynika stąd w szczególności, że przy padaniu wiązki w płaszczyźnie φ_0 fale powierzchniowe nie wzbudzą się. Po drugie, zgodnie z [90], przy odejściu od poprzecznie izotropowej orientacji φ_0 , zachodzi $\mathbf{A}^{(i)} \mathbf{A}^{(\alpha)}$, $\mathbf{A}^{(r)} \mathbf{A}^{(\alpha)} \sim (\Delta \varphi)$. Dlatego odpowiedni człon w (1.137) opisujący interferencję składowej objętościowej i powierzchniowej, jest mały dodatkowo z powodu małej wielkości prawie ortogonalnych iloczynów skalarnych wektorów polaryzacji $\mathbf{A}^{(i)}$, $\mathbf{A}^{(r)}$ i $\mathbf{A}^{(\alpha)}$. Badanie natężenia sumarycznego pola falowego na granicy heksagonalnego kryształu pokazuje, że przy $\kappa^2 \beta \ll 1$, $|\mu| \ll 1$ zależność $|\mathbf{U}(X)|^2$ ma postać „dwugarbną” (rys. 1.13). Pierwsze maksimum opisywane jest równaniem

$$X_{m1} \approx \frac{1}{4} \sqrt{\pi} \zeta \kappa^2 \beta, \quad \frac{|\mathbf{U}|_{m1}^2}{|C \mathbf{A}^{(i)}|^2} \approx 4 + \pi \zeta \kappa^2 \beta. \quad (1.143)$$

Minimum ma współrzędną

$$X_{min} \approx \sqrt{\ln \frac{2\sqrt{\ln(\lambda/\kappa^2 \beta)} + \kappa}{\sqrt{\pi} \zeta \kappa^2 \beta}} + \kappa, \quad (1.144)$$



Rys. 1.13. Kształt natężenia pola falowego $|\mathbf{U}|^2$ na powierzchni kryształu $\text{Pb}_3(\text{SiO}_4)(\text{VO}_4)_2$ dla różnych wartości $\Delta\varphi$ ($\Delta k = 0$) (cyfry przy krzywych podają wartości $\Delta\varphi$ w stopniach) [5]

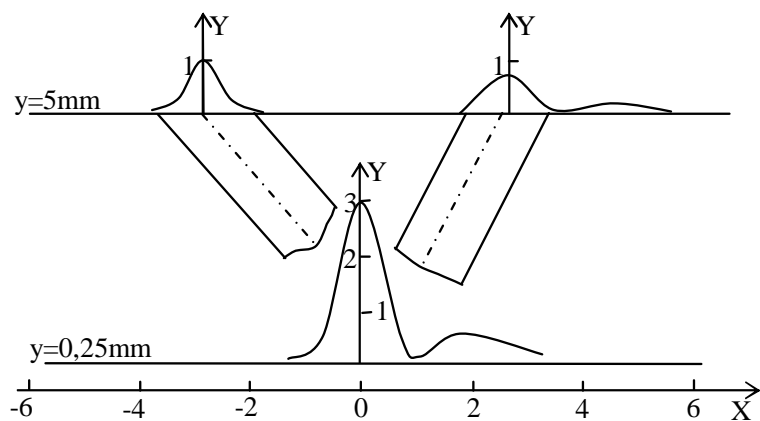
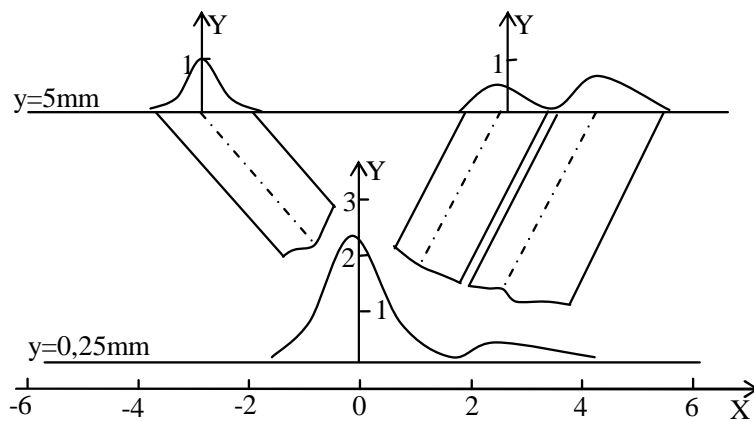
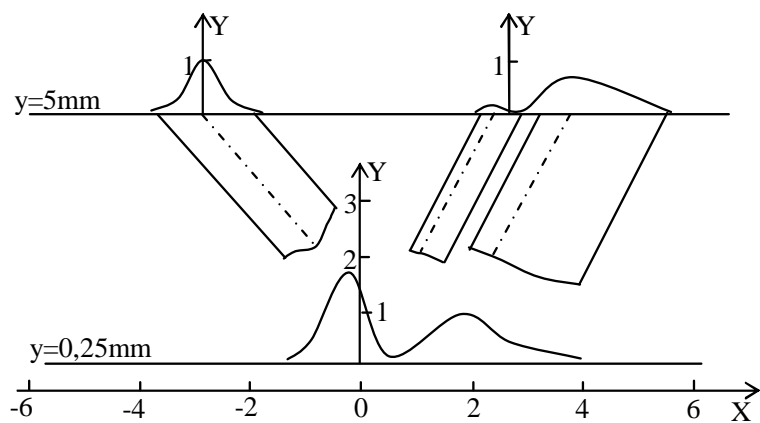
a jego wielkość zbliżona jest do drugiego maksimum spełniającego równania (1.139) i (1.141) (przy czym równanie (1.141) w danym przypadku zachodzi dla $1/\kappa^2\beta \ll \mu^2 \ll 1$). Wraz ze wzrostem parametru $\kappa^2\beta$, gdy zaczyna być spełniony warunek $\kappa^2\beta \gtrsim 1 \gtrsim 2\sqrt{\pi}\kappa$ (ale jak poprzednio $|\mu| \ll 1$), funkcja $|\mathbf{U}(X)|^2$ zachowuje tylko jedno maksimum (1.139) (patrz rys. 1.13). Przy $|\gamma| = \sqrt{\kappa^2 + \mu^2} \gg 1$ i jeśli $\kappa \gtrsim |\mu|$ maksimum to dane jest wzorami (1.142), a jeśli $|\mu| \gg \kappa\sqrt{\beta}$, to wzorami

$$X_m \approx \frac{\zeta\kappa^2\beta}{8\mu^4}, \quad \frac{|\mathbf{U}|_m^2}{|\mathbf{CA}^{(i)}|^2} \approx 4 + \frac{\zeta\kappa^2\beta}{\mu^2}. \quad (1.145)$$

Na rys. 1.13 pokazano wyniki obliczeń komputerowych natężenia pola falowego $|\mathbf{U}|^2$ na powierzchni $y = 0$ dla kryształu heksagonalnego $\text{Pb}_5(\text{SiO}_4)(\text{VO}_4)_2$ przy $k = 0$ i różnych orientacjach $\Delta\varphi$ płaszczyzny padania wiązki. Podstawiając wzięte z literatury wartości doświadczalne stałych sprężystości i kładąc $\omega = 200\text{MHz}$, $w = 5\text{mm}$, otrzymamy następujące wartości dla badanego kryształu: $v_r \approx 1,77 \cdot 10^3\text{m/s}$; $\beta \approx 3,01 \cdot 10^4(\Delta\varphi)^{-2}$; $\kappa \approx 9,4 \cdot 10^{-3}(\Delta\varphi)^2$, czyli $\kappa^2\beta \approx 2,66 \cdot (\Delta\varphi)^2$; $1/|\mathbf{A}^{(i)}|^2 \approx 8,9 \cdot 10^9\text{N/m}^2$; $\zeta \approx 0,178$.

Oddalając się od granicy $y = 0$ w głąb kryształu fale powierzchniowe szybko zanikają. Na przykład, dla rozpatrywanego kryształu na głębokości $y = 0,25\text{ mm}$ amplituda składowych powierzchniowych stanowi zaledwie 10^{-5} swej wielkości na powierzchni. Tak więc, sumaryczne pole falowe na tej głębokości w pełni jest określone przez fale objętościowe (rys. 1.14). Jak się należało spodziewać, interferencja wiązki padającej i odbitej jest istotna tylko w pobliżu ich przekrywania się. Przy wystarczającym oddaleniu od powierzchni, w obszarze przestrzennego rozdzielania wiązek, ta interferencja staje się nieistotna.

Pokazaliśmy więc, że gdy padająca wiązka propaguje się wzdłuż kierunku „średniej” prędkości grupowej i ma taki średni wektor falowy $\mathbf{K}^{(i)}$, że jego rzut na granicę należy do gałęzi fal odciekających lub jest jej bliski, to odbicie w tych warunkach ma dwie osobliwości. Po pierwsze, ma miejsce zjawisko, analogiczne do zjawiska Schocha w cieczy: pojawia się boczne przemieszczenie wiązki odbitej, znacznie przekraczające długość fali i następuje zmiana kształtu wiązki odbitej w porównaniu z wiązką padającą. Po drugie, staje się możliwe wzbudzenie fali powierzchniowej o natężeniu wiele razy przewyższającym natężenie wiązki padającej. Związane jest to z badanym w [13] osobliwymi właściwościami czteroparcjalnego rozwiązania w postaci fal płaskich w pobliżu gałęzi fal odciekających. Rozpatrywane zjawisko ma charakter rezonansowy, sterowany przez odpowiednie proporcje parametrów fizycznych, szerokość i częstotliwość wiązki, a także jej orientację względem ośrodka akustycznie anizotropowego.

(a) $\Delta\varphi = 2$ (b) $\Delta\varphi = 4$ (c) $\Delta\varphi = 6$

Rys. 1.14. Przykładowe profile intensywności pola falowego $|\mathbf{U}|^2$ w kryształach $\text{Pb}_3(\text{SiO}_4)(\text{VO}_4)_2$ w odległości 0,25 mm i 5 mm dla różnych wartości $\Delta\varphi$ ($\Delta k = 0$) ($Y = |\mathbf{U}|^2/|C\mathbf{A}^{(i)}|^2$) [5]

Rozdział 2

Dyssypacja ruchu dyslokacji

Temperatura, w ujęciu klasycznym, jest miarą energii kinetycznej atomów tworzących dane ciało. W kryształach jest to energia kinetyczna drgań atomów wokół ich położeń równowagi. Przy pewnej odpowiednio wysokiej wartości temperatury, różnej dla każdego materiału, następuje zerwanie wiązań międzyatomowych, struktura krystaliczna ciała zostaje zniszczona i kryształ zaczyna topnieć. Struktura krystaliczna ciała może zostać zniszczona, bądź zmieniona, również przez siły nietermiczne w wyniku różnego rodzaju deformacji.

W swoim czasie było wielkim zaskoczeniem dla badaczy, że trwałe deformacje zachodzą przy dużo niższych naprężeniach niż wynikało to z modeli ciał stałych zakładających idealną budowę krystaliczną ciała. Wyjaśnienie tego faktu stało się możliwe dopiero po uwzględnieniu defektów budowy idealnej sieci. Powszechnie przyjęta jest systematyzacja defektów sieci krystalicznej ze względu na ich wymiar geometryczny:

1. defekty punktowe (atomy obce w węzłach sieci krystalicznej), atomy międzywęzłowe, wakansje (braki atomów w regularnych położeniach węzłowych),
2. defekty liniowe (dyslokacje i dysklinacje),
3. defekty powierzchniowe (granice ziaren w polikryształach, powierzchnie bliźniakowania),
4. defekty objętościowe (crowdiony – czyli zgrupowania defektów punktowych), szczeliny, błędy ułożenia płaszczyzn sieci krystalicznej.

Okazało się, że największą rolę w ułatwianiu deformacji sieci krystalicznej odgrywają dyslokacje.

Jeśli na ciało działa niewielka siła (z inżynierskiego punktu widzenia), to ciało ulega deformacji sprężystej i po ustaniu działania przyłożonej siły deformacja zanika całkowicie niemal natychmiast. Sumaryczna praca

wykonana przez przyłożoną siłę i przez siły sprężyste przywracające ciało konfigurację początkową wynosi zero, nie nastąpiła dyssypacja energii. Zupełnie inaczej przedstawia się sytuacja w trakcie deformacji plastycznej: ciało nie powraca już samoczynnie do konfiguracji początkowej, tylko w sposób trwały przyjmuje inny kształt, zarówno w sensie makroskopowym jak i mikroskopowym. Zjawiska towarzyszące ruchowi dyslokacji w trakcie deformacji plastycznej ciała to na przykład:

- rozpraszanie fononów,
- wiatr fononowy,
- drgania linii dyslokacji,
- tarcie radiacyjne.

Wyliczyliśmy tylko niektóre zjawiska mające bezpośredni związek z oddziaływaniem dyslokacji z fononami. Pełny opis dyssypacji wymaga uwzględnienia jeszcze innych oddziaływań, jak np. z elektronami przewodnictwa, ekscytonami, magnonami. . . Te zjawiska zostały przeanalizowane w przeglądowych pracach [4], [9] i [10].

Tutaj, w kolejnych podrozdziałach, omówimy tylko sposób oceniania zmian wielkości dyssypacji spowodowanej ruchem dyslokacji w zależności od temperatury, demonstrując różne mechanizmy hamowania ruchu dyslokacji w wyniku jej oddziaływania z drganiami sieci krystalicznej, czyli z gazem fononowym, na podstawie prac [11] i [14].

2.1. Lepkie hamowanie ruchu dyslokacji

Jeśli jakiś obiekt, materialny (np. atom wtrącenia) lub strukturalny (np. dyslokacja), przemieszcza się poprzez ciało, to następuje zakłócenie stanu równowagi układu, a w tym i stanu równowagi gazu fononowego. Poruszający się obiekt oddaje swą energię gazowi fononowemu i w rezultacie następuje wyhamowanie ruchu obiektu. Jeśli prędkość ruchu obiektu v jest mała w porównaniu z prędkością dźwięku c w kryształach, to można zaniedbać efekty „relatywistyczne” i potraktować sprężyste pole deformacji $\varepsilon_{ij}(\mathbf{r}, t)$ (z wystarczającą dokładnością) jako pole quasistatyczne, przemieszczające się z prędkością \mathbf{v}

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{r}, t) \approx \varepsilon_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{v}t). \quad (2.1)$$

Pole deformacji wygodnie jest przedstawić w postaci pakietu fal płaskich:

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \varepsilon_{ij}^{\mathbf{q}} e^{i(\mathbf{q}\mathbf{r} - \Omega_{\mathbf{q}}t)}, \quad (2.2)$$

gdzie $\varepsilon_{ij}^{\mathbf{q}}$ – transformata Fouriera statycznego pola deformacji kryształu wokół linii dyslokacji ε_{ij} , a $\Omega_{\mathbf{q}} = \mathbf{q}\mathbf{v}$. W tej reprezentacji tłumienie ruchu dyslokacji w przybliżeniu liniowym wyraża się poprzez tłumienie poszczególnych fal pakietu fal płaskich

$$D = \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \Omega_{\mathbf{q}} \eta_{ijkl}(\mathbf{q}, \Omega_{\mathbf{q}}) \varepsilon_{ij}^{\mathbf{q}} \varepsilon_{ij}^{-\mathbf{q}}, \quad (2.3)$$

gdzie D – przyrost dyssypacji energii na jednostkę czasu, $\eta_{ijkl}(\mathbf{q}, \Omega_{\mathbf{q}})$ – efektywna lepkość fali z wektorem falowym \mathbf{q} i częstotliwością $\Omega_{\mathbf{q}}$.

W eksperymentach mierzony jest tzw. współczynnik dynamicznego hamowania ruchu dyslokacji B , definiowany jako współczynnik proporcjonalności pomiędzy siłą lepkiego hamowania dyslokacji F a prędkością ruchu dyslokacji v (na jednostkę długości linii dyslokacji)

$$F = v B. \quad (2.4)$$

Związek pomiędzy B a D jest następujący:

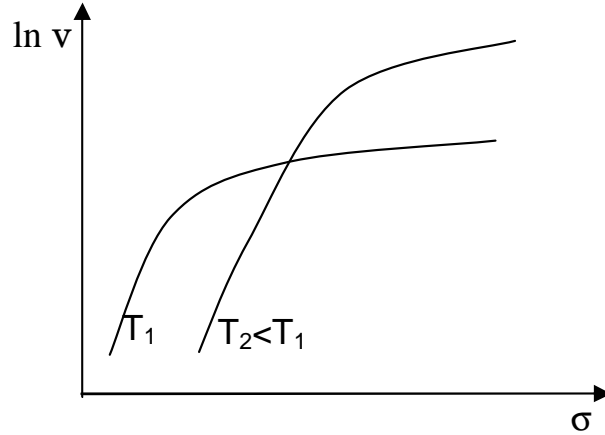
$$D = v^2 B, \quad (2.5)$$

a więc

$$D = v F. \quad (2.6)$$

Typowe wartości B dla różnych kryształów w temperaturze pokojowej wynoszą od 10^{-3} do 10^{-4} puaz, a więc są takie, jak dla bardzo gęstego gazu [9].

Z rys. (2.1) wyraźnie widać, że istnieje kilka mechanizmów hamowania ruchu dyslokacji: wraz ze wzrostem naprężenia prędkość dyslokacji rośnie, ale szybciej dla tej w niższej temperaturze. Potem, mimo wzrostu naprężenia prędkość dyslokacji ustala się – praktycznie osiąga wartość maksymalną, gdyż włączają się mechanizmy nie pozwalające na jej dalszy wzrost.



Rys. 2.1. Schematyczna zależność prędkości ruchu dyslokacji od naprężenia w funkcji temperatury

Zarówno w sytuacji równowagi, jak i w trakcie ruchu dyslokacji, pole sprężyste kryształu wokół dyslokacji jest zakłócone samą obecnością dyslokacji. Niech u_i oznacza wektor przemieszczenia węzła sieci krystalicznej (w teorii kontynualnej jest to wektor przemieszczenia punktu materialnego) [153]. Punkt, który przed deformacją znajdował się w położeniu x_i , po deformacji znajdzie się w miejscu

$$x_i \rightarrow x_i + u_i(x_k, t). \quad (2.7)$$

Tensor odkształcenia ϵ_{ij} jest definiowany jako symetryczna suma gradientów przemieszczenia

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}). \quad (2.8)$$

Z tej definicji wynika, że tensor odkształcenia jest tensorem symetrycznym, czyli $\epsilon_{ij} = \epsilon_{ji}$.

Aby odkształcić ciało należy wykonać pewną pracę, tak więc w trakcie odkształcania materiału gromadzona jest w nim energia. Jeśli proces odkształcania jest procesem *izentropowym*, czyli odwracalnym i adiabatycznym, to jest to energia wewnętrzna, będąca funkcją tensora odkształcenia ϵ_{ij} i gęstości entropii η

$$e = e(\epsilon_{ij}, \eta). \quad (2.9)$$

Jeśli natomiast proces odkształcania jest izotermiczny, to jest to energia swobodna, będąca funkcją tensora odkształcenia ϵ_{ij} i temperatury T

$$\psi = \psi(\epsilon_{ij}, T). \quad (2.10)$$

Tensor naprężenia σ_{ij} jest określany jako pochodna energii względem odkształcenia

$$\sigma_{ij} = \rho_0 \frac{\partial e}{\partial \epsilon_{ij}}, \quad (2.11)$$

gdzie ρ_0 – gęstość masy w stanie nieodkształconym. W liniowej teorii sprężystości energia e jest kwadratową funkcją tensora odkształcenia

$$e = \frac{1}{2\rho_0} c_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl}, \quad (2.12)$$

natomiast my będziemy tu korzystali z nieliniowej teorii sprężystości, gdyż będziemy musieli uwzględniać efekty anharmoniczne. W tym przypadku zależność energii od odkształcenia jest następująca:

$$e = \frac{1}{2\rho_0} c_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} + \frac{1}{2\rho_0} d_{ijklmn} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} \epsilon_{mn}. \quad (2.13)$$

Tensory c_{ijkl} i d_{ijklmn} są tensorami stałych sprężystości drugiego i trzeciego rzędu. Łatwo widać, że tensor c_{ijkl} ma następujące symetrie

$$c_{ijkl} = c_{jikl} = c_{ijlk} = c_{klij}. \quad (2.14)$$

Z definicji (2.9) wynika, że tensor stałych sprężystych są funkcjami entropii. Zgodnie z wzorami (2.11) i (2.14) mamy

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji} = c_{ijkl} \epsilon_{kl} = c_{ijkl} u_{k,l}. \quad (2.15)$$

Ciało pozostaje w równowadze (dynamicznej), jeśli spełnione jest równanie ruchu

$$\sigma_{ij,j} = \rho_0 u_{i,tt}, \quad (2.16)$$

które można wyrazić poprzez same przemieszczenia i ich pochodne, korzystając ze wzoru (2.15) w postaci układu trzech liniowych równań różniczkowych drugiego rzędu, przyjmujących w przypadku liniowym postać:

$$L_{ik} = c_{ijkl} u_{k,lj} + c_{ijk,lj} u_{k,l} - \rho_0 u_{i,tt} = 0. \quad (2.17)$$

Zamiast przemieszczeń można użyć do sformułowania równań ruchu deformacji.

2.2. Hamowanie ruchu dyslokacji poprzez wiatr fononowy

W pracy [9] pokazano, że istnieje taki zakres (niezbyt niskich) temperatur, w których decydującą rolę w hamowaniu ruchu dyslokacji odgrywają fonony, a nie na przykład takie zjawiska jak flutter, czy też procesy relaksacyjne. W takiej sytuacji, przy opisie ruchu dyslokacji, te i inne dodatkowe zjawiska, jak na przykład drganie linii dyslokacji pod wpływem pola temperatury, mogą zostać pominięte. Przy tych założeniach osiąga się zadowalającą dokładność modelowania, jeśli weźmie się pod uwagę tylko dalekozasięgowe składowe sprężystego pola poruszającej się dyslokacji. Dla badanego zakresu temperatur dobrym przybliżeniem widma fononowego jest przybliżenie Debye'a, w części mechanicznej kontynualna teoria dyslokacji nie uwzględniająca istnienia jądra dyslokacji.

Zjawisko rozpraszania fononów na poruszającej się dyslokacji może być opisane przez następujący zależny od czasu Hamiltonian [14]

$$H(t) = \sum_{\alpha, \beta} \Gamma_{\alpha\beta} \xi_{\alpha} \xi_{\beta}^+ e^{-i\Omega_{\mathbf{q}} t}. \quad (2.18)$$

Indeksy α, β oznaczają różne stany fononowe, określone przez pary: wektor falowy \mathbf{k} i polaryzacja λ : $\alpha = (\mathbf{k}, \lambda)$, $\beta = (\mathbf{k}', \lambda')$, przy czym $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{q}$, $\Omega_{\mathbf{q}} = \mathbf{q} \mathbf{v}$, $\xi_{\alpha} = a_{\mathbf{k}\lambda} + a_{-\mathbf{k}\lambda}^+$, $a_{-\mathbf{k}\lambda}^+$, $a_{\mathbf{k}\lambda}$ – odpowiednio operatory kreacji i anihilacji fononów, a ponadto

$$\Gamma_{\alpha\beta} = \frac{\hbar A_{ism}^{jtn} l_{\alpha i} l_{\beta s}^* k_j k_t \hat{u}_{mn}(\mathbf{q})}{4 \rho \sqrt{\omega_{\alpha} \omega_{\beta}}}, \quad (2.19)$$

\hbar – stała Plancka, \mathbf{l}_{α} – polaryzacja fononu w stanie α , ρ – gęstość masy niezdeformowanego kryształu, $\hat{u}_{mn}(\mathbf{q})$ – transformata Fouriera statycznego pola dystorsji wokół linii dyslokacji, A_{ism}^{jtn} – znormalizowane anharmoniczne stałe sprężystości [4], ω_{α} – częstość fononu w stanie α .

Można pokazać, że w rozważanym zakresie niskich temperatur hamiltonian oddziaływania (2.18) jest wystarczająco mały, aby można było zastosować kwantowo-mechaniczną teorię perturbacji. W teorii perturbacji pierwszego rzędu prawdopodobieństwo rozproszenia fononu ze stanu α do stanu β na jednostkę czasu wynosi

$$W_{\alpha\beta} = \frac{8 \pi}{\hbar^2} |\Gamma_{\alpha\beta}|^2 \delta(\omega_{\alpha} - \omega_{\beta} - \Omega_{\mathbf{q}}), \quad (2.20)$$

gdzie $\delta(\omega)$ – delta Diraca.

Liczba przejść od stanu α do stanu β na jednostkę czasu dana jest jako iloczyn prawdopodobieństwa $W_{\alpha\beta}$ i gęstości fononów n_α w stanie α :

$$n_\alpha = \left[\exp\left(\frac{\hbar\omega_\alpha}{k_B T}\right) - 1 \right]^{-1}, \quad (2.21)$$

gdzie k_B – stała Boltzmanna. W każdym akcie rozpraszania przekazywana jest energia $\hbar(\omega_\alpha - \omega_\beta) = \hbar\Omega_{\mathbf{q}}$, a więc dyssypacja energii na jednostkę czasu i na jednostkę długości linii dyslokacji wynosi

$$\begin{aligned} D &= -\frac{8\pi}{\hbar L} \sum_{\alpha,\beta} \Omega_{\mathbf{q}} |\Gamma_{\alpha\beta}|^2 n_\alpha \delta(\omega_\alpha - \omega_\beta - \Omega_{\mathbf{q}}) \\ &= -\frac{4\pi}{\hbar L} \sum_{\alpha,\beta} \Omega_{\mathbf{q}} |\Gamma_{\alpha\beta}|^2 (n_\alpha - n_\beta) \delta(\omega_\alpha - \omega_\beta - \Omega_{\mathbf{q}}), \end{aligned} \quad (2.22)$$

gdzie L jest długością linii dyslokacji (w przypadku dyslokacji prostoliniowej jest to średnica kryształu wzdłuż linii dyslokacji).

Jeśli po rozwinięciu w szereg względem potęg v/c wyrażenia (2.22) pozostawimy tylko pierwsze nieznikające składniki i skorzystamy z faktu, że

$$\begin{aligned} n_\alpha - n_\beta &= n(\omega_\alpha) - n(\omega_\beta - \Omega_{\mathbf{q}}) \simeq n(\omega_\alpha) - n(\omega_\alpha) + \frac{\partial n_\alpha}{\partial \omega_\alpha} \Omega_{\mathbf{q}} \\ &= \Omega_{\mathbf{q}} \frac{\partial n_\alpha}{\partial \omega_\alpha}, \end{aligned} \quad (2.23)$$

to w argumentie funkcji delta-Diraca możemy pominąć składnik $\Omega_{\mathbf{q}}$. Wyrażenie na dyssypację energii D przyjmie teraz następującą postać:

$$D = -\frac{4\pi}{\hbar L} \sum_{\alpha,\beta} \Omega_{\mathbf{q}}^2 |\Gamma_{\alpha\beta}|^2 \frac{\partial n_\alpha}{\partial \omega_\alpha} \delta(\omega_\alpha - \omega_\beta). \quad (2.24)$$

W następnym podrozdziale znajdziemy jawną postać $\hat{u}_{mn}(\mathbf{q})$ – transformaty Fouriera statycznego pola dystorsji wokół linii dyslokacji dla dyslokacji prostoliniowej i dla pętli dyslokacji.

2.3. Pole dystorsji dla dyslokacji prostoliniowej i dla pętli dyslokacji

Sprężyste pole dystorsji pochodzące od dowolnej dyslokacji o wektorze Burgersa \mathbf{b} wyraża się za pomocą tensora Greena $G_{ik}(\mathbf{r})$ teorii sprężystości wzorem [74]:

$$u_{ij}(\mathbf{r}) = -c_{klpq} b_p \int_S dS' n_q \nabla_l \nabla_j G_{ik}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \overset{\circ}{u}_{ij}(\mathbf{r}). \quad (2.25)$$

Całkowanie przebiega po dowolnej powierzchni S ograniczonej linią dyslokacji, \mathbf{n} – wektor normalny do powierzchni S , c_{klpq} – tensor stałych sprężystości, a $\overset{\circ}{u}_{ij}(\mathbf{r})$ – tensor dystorsji wewnętrznych.

Jeśli wybierzemy S jako część płaszczyzny xz , to dla dyslokacji prostoliniowej [65]

$$\overset{\circ}{u}_{ij}(\mathbf{r}) = b_i n_j \delta(y) \eta(x), \quad (2.26)$$

gdzie $\eta(\cdot)$ – funkcja Heaviside'a, a dla pętli dyslokacji

$$\overset{\circ}{u}_{ij}(\mathbf{r}) = b_i n_j \delta(y) \eta(R^2 - z^2) [\eta(x + \sqrt{R^2 - z^2}) - \eta(x - \sqrt{R^2 - z^2})]. \quad (2.27)$$

Tensor Greena $G_{ik}(\mathbf{r})$ jest rozwiązaniem statycznego równania teorii sprężystości

$$c_{ijkl} \nabla_k \nabla_l G_{ml}(\mathbf{r}) + \delta_{im} \delta(\mathbf{r}) = 0, \quad (2.28)$$

gdzie δ_{ij} – delta Kroneckera.

Poszukując rozwiązania równania (2.28) wygodnie jest zastosować technikę transformacji Fouriera. Rozłóżmy w tym celu tensor $G_{ml}(\mathbf{r})$ w szereg Fouriera

$$G_{ml}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} \hat{G}_{ml}(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}. \quad (2.29)$$

Po wstawieniu (2.29) do (2.28) otrzymujemy proste równanie algebraiczne na $\hat{G}_{ml}(\mathbf{q})$

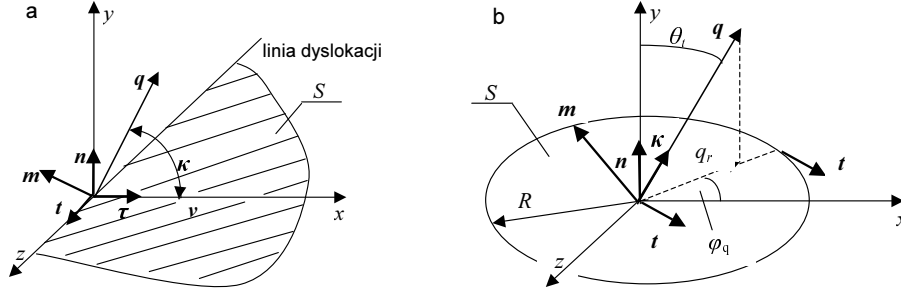
$$q^2 \Lambda_{lm}(\boldsymbol{\kappa}) \hat{G}_{ml}(\mathbf{q}) = 1, \quad (2.30)$$

gdzie

$$\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{q}/q, \quad \Lambda_{lm}(\boldsymbol{\kappa}) = \kappa_j c_{jlmn} \kappa_n. \quad (2.31)$$

Wykorzystując ten wynik w równaniu (2.29), dostajemy

$$G_{ml}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} \frac{\Lambda_{lm}^{-1}(\boldsymbol{\kappa})}{q^2} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}. \quad (2.32)$$



Rys. 2.2. Układy współrzędnych: (a) dyslokacja prostoliniowa, (b) pętla linii dyslokacji [14]

Transformaty Fouriera w równaniach (2.25) - (2.27), uwzględniające (2.29), przyjmują teraz następujące formy:

— dla dyslokacji prostoliniowej

$$\hat{u}_{ij}^d(\mathbf{q}) = -\frac{i L S_{ijkl}^*(\boldsymbol{\kappa}) b_k m_l}{q} \delta_{q_z,0}, \quad (2.33)$$

— dla pętli dyslokacji

$$\hat{u}_{ij}^l(\mathbf{q}) = 2 \pi R S_{ijkl}^*(\boldsymbol{\kappa}) b_k m_l \frac{J_1(q_\rho R)}{q_\rho}, \quad (2.34)$$

gdzie

$$S_{ijkl}^*(\mathbf{q}) = \delta_{ik} \delta_{jl} - c_{klmn} \kappa_m \Lambda_{ni}^{-1}(\boldsymbol{\kappa}) \kappa_j, \quad (2.35)$$

$J_1(\cdot)$ – funkcja Bessela, $q_\rho = \sqrt{q_x^2 + q_z^2}$, $\mathbf{m} = \mathbf{t} \times \boldsymbol{\kappa}$, \mathbf{t} – wektor styczny do linii dyslokacji (rys. 2.2).

Równanie (2.34) można łatwo zastosować do przypadku pętli linii dyslokacji w kształcie elipsy

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{z^2}{d^2} = 1.$$

W tym przypadku odpowiednie wyrażenie na $\hat{u}_{ij}^l(\mathbf{q})$ przyjmuje postać

$$\hat{u}_{ij}^l(\mathbf{q}) = 2 \pi a d S_{ijkl}^*(\boldsymbol{\kappa}) b_k m_l \frac{J_1(\sqrt{(a q_x)^2 + (d q_z)^2})}{\sqrt{(a q_x)^2 + (d q_z)^2}}. \quad (2.36)$$

W kolejnych podrozdziałach przedyskutujemy tylko dyslokację prostoliniową i okrągłą pętlę linii dyslokacji.

2.4. Hamowanie ruchu dyslokacji prostoliniowej

Do procesu hamowania ruchu dyslokacji największy wkład wnoszą procesy oddziaływania dyslokacji z tzw. fononami poprzecznymi [9], więc w poniższych oszacowaniach ograniczymy się tylko do tej grupy fononów. Biorąc pod uwagę wzory (2.19) i (2.33) można pokazać, że

$$|\Gamma_{\alpha\beta}|^2 = \left(\frac{\hbar L b \omega_\alpha}{4q} \right)^2 \delta_{q_z,0} \mathcal{F}_{\alpha\beta}, \quad (2.37)$$

gdzie $\mathcal{F}_{\alpha\beta}$ – bezwymiarowa funkcja o postaci

$$\mathcal{F}_{\alpha\beta} = \left| \frac{A_{isp}^{jtq} l_{\alpha i} l_{\beta s}^* k_j k_t' S_{pqkl}^*(\mathbf{q}/q) b_k m_l}{\rho b \omega_\alpha \omega_\beta} \right|^2. \quad (2.38)$$

Jeśli teraz sumowanie po \mathbf{k} i \mathbf{k}' zastąpimy całkowaniem po \mathbf{k} i $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ to otrzymamy, że przyrost dyssypacji energii na jednostkę czasu wynosi

$$D = -\frac{\pi \hbar b^2}{4} \sum_{\lambda, \lambda'} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \omega_\alpha^2 \frac{\partial n_\alpha}{\partial \omega_\alpha} \int \frac{d^2 q}{(2\pi)^2} \frac{(\mathbf{q} \cdot \mathbf{v})^2}{q^2} \mathcal{F}_{\alpha\beta} \delta(\omega_\alpha - \omega_\beta). \quad (2.39)$$

Całkowanie po \mathbf{q} przebiega po płaszczyźnie normalnej do linii dyslokacji (rys. 2.2). Rachunki przeprowadzimy we współrzędnych biegunowych, licząc kąt $\varphi_{\mathbf{q}}$ od kierunku prędkości dyslokacji \mathbf{v} (od osi Ox). Całkowanie po \mathbf{k} wygodnie jest wykonać we współrzędnych sferycznych, licząc kąt $\theta_{\mathbf{k}}$ od kierunku wektora \mathbf{q} i odpowiednio kąt $\phi_{\mathbf{k}}$ w płaszczyźnie prostopadłej do wektora \mathbf{q} . Funkcja $\mathcal{F}_{\alpha\beta}$ wyraża się wtedy przez współrzędne $\varphi_{\mathbf{q}}$, $\varphi_{\mathbf{k}}$ i $\cos(\theta_{\mathbf{k}})$

$$\mathcal{F}_{\alpha\beta} = \mathcal{F}_{\lambda\lambda'}(\varphi_{\mathbf{q}}, \varphi_{\mathbf{k}}, \cos(\theta_{\mathbf{k}})). \quad (2.40)$$

Po uwzględnieniu powyższych uwag otrzymujemy, że

$$D = -\frac{\pi}{4} \frac{\hbar b^2 v^2}{(2\pi c_t)^5} \sum_{\lambda, \lambda'} \int_0^{c_t k_D} d\omega \omega^4 \frac{\partial n}{\partial \omega} \int_0^{2\pi} d\omega_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} \int_0^{2\pi} d\varphi_{\mathbf{q}} \cos^2 \varphi_{\mathbf{q}} \int_0^{2\pi} d\varphi_{\mathbf{k}} \times \int_0^{\pi} d\theta_{\mathbf{k}} \sin \theta_{\mathbf{k}} \mathcal{F}_{\lambda\lambda'}(\varphi_{\mathbf{q}}, \varphi_{\mathbf{k}}, \cos \theta_{\mathbf{k}}) \delta(\omega - \sqrt{\omega^2 + \omega_{\mathbf{q}}^2 - 2\omega\omega_{\mathbf{q}} \cos \theta_{\mathbf{k}}}). \quad (2.41)$$

Tutaj k_D – graniczna wartość widma Debye'a, $\omega_{\mathbf{q}} = q c_t$, c_t – średnia prędkość fononów poprzecznych.

Ostatnia całka we wzorze (2.41) wynosi

$$\int_0^{\pi} d\theta_{\mathbf{k}} \sin \theta_{\mathbf{k}} \mathcal{F}_{\lambda\lambda'}(\varphi_{\mathbf{q}}, \varphi_{\mathbf{k}}, \cos \theta_{\mathbf{k}}) \delta(\omega - \sqrt{\omega^2 + \omega_{\mathbf{q}}^2 - 2\omega\omega_{\mathbf{q}} \cos \theta_{\mathbf{k}}}) = \frac{\eta(2\omega - \omega_{\mathbf{q}})}{\omega_{\mathbf{q}}} \mathcal{F}_{\lambda\lambda'}(\varphi_{\mathbf{q}}, \varphi_{\mathbf{k}}, \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{2\omega}). \quad (2.42)$$

Wstawiając ten wynik do równania (2.41) otrzymujemy, że

$$D = -g \frac{\hbar b^2 v^2}{(2\pi c_t)^5} \int_0^{c_t k_D} d\omega \omega^5 \frac{\partial n}{\partial \omega}, \quad (2.43)$$

gdzie przez g oznaczyliśmy stałą wielkość

$$g = \frac{\pi}{2} \int_0^{2\pi} d\varphi_{\mathbf{q}} \cos^2 \varphi_{\mathbf{q}} \int_0^{2\pi} d\varphi_{\mathbf{k}} \int_0^1 dt \sum_{\lambda, \lambda'} \mathcal{F}_{\lambda\lambda'}(\varphi_{\mathbf{q}}, \varphi_{\mathbf{k}}, t). \quad (2.44)$$

Jeśli teraz zamienimy zmienną całkowania we wzorze (2.43) na zmienną bezwymiarową $\hbar\omega/k_B T$, to współczynnik hamowania ruchu dyslokacji $B = D/v^2$ dany jest jak poniżej:

$$B = g \frac{\hbar}{b^3} \left(\frac{k_D b}{2\pi} \right)^5 f(T/\theta_t), \quad (2.45)$$

gdzie $\theta_t = c_t k_D/k_B$ – zmodyfikowana temperatura Debye'a, a funkcja $f(x)$:

$$f(x) = x^5 \int_0^{1/x} \frac{e^t t^5 dt}{(e^t - 1)^2}, \quad (2.46)$$

opisuje zależność od temperatury. We wzorze (2.45) występuje parametr $g \sim |A/\mu|$ (A – charakterystyczna wartość stałej anharmonicznej, μ – moduł ścinania), którego wartość możemy teraz oszacować tylko z dokładnością co do rzędu wielkości. Aby znaleźć dokładną wartość g trzeba przeprowadzić szczegółowe obliczenia, które dla dyslokacji śrubowej i krędziowej zostaną przedstawione w podrozdziale 2.6 na stronie 82. Ale również i w powyższej postaci wzór (2.45) zawiera pożyteczne informacje, pozwalające w szczególności przedyskutować opisaną wzorem (2.46) zależność omawianego zjawiska od temperatury.

W niskich temperaturach wiatr fononowy jest szybko „wymrażany”: $B \sim T^5$. Wraz ze wzrostem temperatury funkcja $f(T/\theta_i)$ staje się liniowa, a więc jej zachowanie zmienia się w sposób istotny. Efekt ten zachodzi już dla temperatur znacznie niższych od temperatury Debye’a.

Zwróćmy uwagę, że w wysokich temperaturach, wzory (2.45) i (2.46) przeszacowują efekt, ponieważ zaniedbaliśmy wpływ jądra dyslokacji. W podrozdziale 2.6 pokażemy, że uwzględnienie jądra dyslokacji nawet w prostym modelu, prowadzi do pewnej renormalizacji wyrażenia podcałkowego we wzorze (2.46).

2.5. Hamowanie ruchu okrągłej pętli linii dyslokacji

Poprzednie rozważania dotyczyły dyslokacji prostoliniowej. Otrzymane wyniki mogą być zastosowane do dyslokacji krzywoliniowych, na przykład do pętli dyslokacji, tylko w tych przypadkach, kiedy średnia długość fali fononów jest mała w porównaniu z promieniem krzywizny linii dyslokacji. Taka sytuacja zachodzi tylko dla niezbyt niskich temperatur. Mamy tu więc okazję przedyskutować, jakie poprawki powinny zostać poczynione do opisu zależności $B(T)$ od temperatury, jeśli w rozważaniach uwzględnić wpływ krzywizny linii dyslokacji i od jakiej wartości temperatury ta zależność nie różni się istotnie od zależności (2.45).

Problem ten był badany również w pracy [11], ale tylko w przypadku izotropowym i w bardzo uproszczonej reprezentacji tensora $\hat{u}_{ij}(\mathbf{q})$. Z tego też powodu, ograniczono się tam tylko do oszacowania rzędu zjawiska.

Rozważania przeprowadzone w podrozdziale 2.3 pozwalają przeanalizować jak wraz ze wzrostem temperatury i odpowiadającą mu rosnącą długością fali fononów λ_{ph} zmienia się charakter współczynnika hamowania ruchu

dyslokacji od zależności danej wzorem (2.46) i prawdziwej dla $\lambda_{ph} \ll R$, aż do bardziej ostrej zależności od temperatury dla $\lambda_{ph} \gg R$, kiedy to fonony reagują na pętlę dyslokacji jak na defekt punktowy. Z drugiej strony, w granicznym przypadku, kiedy promień R pętli jest rzędu wielkości stałej sieci krystalicznej, to wyrażenie na B stosuje się również do oceny wpływu fononów na hamowanie ruchu skupisk defektów punktowych (crowdionów).

Dyssypacja energii na jednostkę czasu, towarzysząca ruchowi pętli linii dyslokacji, jest opisana wyrażeniem (2.24), w którym należy teraz położyć $L = 2\pi R$, a wielkość $\Gamma_{\alpha\beta}$, daną wzorami (2.19) i (2.34), możemy przedstawić tu w postaci analogicznej do wyrażenia (2.37)

$$|\Gamma_{\alpha\beta}|^2 = \left(\frac{\pi R b \hbar \omega_\alpha}{2q} \right)^2 J_1^2(q\rho R) \mathcal{F}_{\alpha\beta}, \quad (2.47)$$

gdzie $\mathcal{F}_{\alpha\beta}$, jak poprzednio, dana jest wzorem (2.38), z tą tylko różnicą, że wektor $\mathbf{m} = \mathbf{t} \times \boldsymbol{\kappa}$ (patrz rys. 2.2 b) jest zastąpiony tu przez zmienny wektor \mathbf{t} , styczny do linii dyslokacji. Wektor \mathbf{t} obraca się zgodnie ze zmianą kąta azymutalnego $\varphi_{\mathbf{q}}$ wektora $\boldsymbol{\kappa}$, ale jest zawsze prostopadły do rzutu wektora \mathbf{q} na płaszczyznę pętli.

Wstawiając równanie (2.47) do równania (2.24) otrzymujemy

$$D = - \frac{\pi^2 \hbar b^2 R}{2} \sum_{\lambda, \lambda'} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \omega_\alpha^2 \frac{\partial n_\alpha}{\partial \omega_\alpha} \times \quad (2.48)$$

$$\times \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{(\mathbf{q} \mathbf{v})^2}{q^2} J_1^2(q R) \mathcal{F}_{\alpha\beta} \delta(\omega_\alpha \omega_\beta).$$

Przykładowe obliczenia zostaną przeprowadzone teraz dla pryzmatycznej pętli linii dyslokacji. Pętla porusza się w kierunku wektora Burgera \mathbf{b} , prostopadłego do płaszczyzny pętli. Całkowanie po \mathbf{k} wygodnie jest przeprowadzić we współrzędnych sferycznych, licząc kąt biegunowy $\theta_{\mathbf{k}}$ od kierunku wektora \mathbf{q} . Całkowanie po \mathbf{q} przeprowadzimy również we współrzędnych sferycznych, ale z kątem azymutalnym $\varphi_{\mathbf{q}}$ w płaszczyźnie pętli, gdzie kąt biegunowy $\theta_{\mathbf{q}}$ jest mierzony od kierunku wektora prędkości \mathbf{v} . Tak więc, funkcję $\mathcal{F}_{\alpha\beta}$ możemy teraz wyrazić w tych właśnie współrzędnych

$$\mathcal{F}_{\alpha\beta} \equiv \mathcal{F}_{\lambda\lambda'}(\varphi_{\mathbf{q}}, \cos \theta_{\mathbf{q}}, \varphi_{\mathbf{k}}, \cos \theta_{\mathbf{k}}). \quad (2.49)$$

Obliczenia dają następujące wyrażenie na współczynnik hamowania ruchu dyslokacji dla pętli dyslokacji

$$B = \frac{\hbar}{b^3} \left(\frac{k_D b}{2\pi} \right)^5 \tilde{f}(T/\Theta_t), \quad (2.50)$$

z zależnością od temperatury daną wyrażeniem

$$\tilde{f}(x) = x^4 \int_0^{1/x} \frac{e^{t^5} dt}{(e^t - 1)^2} \psi(\gamma x t), \quad (2.51)$$

gdzie $\gamma = 2k_D R$, a funkcja $\psi(y)$ definiująca różnicę pomiędzy wzorami (2.51) a (2.46), przyjmuje postać

$$\begin{aligned} \psi(y) = & \frac{\pi y}{2} \int_{-1}^1 du u^2 \int_0^1 dv v J_1^2(y v \sqrt{1-u^2}) \times \\ & \times \int_0^{2\pi} d\varphi_{\mathbf{k}} \int_0^{2\pi} d\varphi_{\mathbf{q}} \sum_{\lambda, \lambda'} \mathcal{F}_{\lambda\lambda'}(\varphi_{\mathbf{q}}, u, \varphi_{\mathbf{k}}, v). \end{aligned} \quad (2.52)$$

Powyższe trzy wzory (2.50) – (2.52) umożliwiają badanie wpływu temperatury na hamowanie ruchu pętli dyslokacji zarówno w niskich jak i w wysokich temperaturach.

Dla temperatur niskich, czyli dla $T \ll \theta_t/\gamma$, główny wkład do całki (2.51) dają wartości $t \sim 1$. Tak więc, aby znaleźć wartość funkcji $\tilde{f}(T/\theta_t)$ w tym obszarze temperatur, wystarczy znać zachowanie się funkcji $\psi(y)$ dla małych wartości argumentu. Uwzględniając, że dla $y \ll 1$

$$J_1^2(y v \sqrt{1-u^2}) \simeq \frac{1}{4} y^2 v^2 (1-u^2), \quad (2.53)$$

funkcja $\psi(y)$ w tym obszarze przyjmuje postać

$$\psi(y) = \tilde{g} y^3, \quad (2.54)$$

gdzie

$$\begin{aligned} \tilde{g} = & \frac{\pi}{8} \int_{-1}^1 du (1-u^2) \int_0^1 dv v^3 \times \\ & \times \int_0^{2\pi} d\varphi_{\mathbf{k}} \int_0^{2\pi} d\varphi_{\mathbf{q}} \sum_{\lambda, \lambda'} \mathcal{F}_{\lambda\lambda'}(\varphi_{\mathbf{q}}, u, \varphi_{\mathbf{k}}, v) \sim g/30. \end{aligned} \quad (2.55)$$

Jeśli teraz uwzględnimy wyrażenie (2.54), to funkcja $\tilde{f}(T/\theta_t)$ dla $T \ll \theta_t/\gamma$ może być przedstawiona w postaci

$$\tilde{f}(T/\theta_t) \approx \frac{(2\pi)^8}{60} \tilde{g} \gamma^3 \left(\frac{T}{\theta_t}\right)^8. \quad (2.56)$$

Tak więc, w bardzo niskich temperaturach hamowanie pętli dyslokacji jest „wymrażane” bardziej gwałtownie niż dla dyslokacji prostoliniowej.

Analogicznie postępując w przypadku wysokich temperatur $T \gg \theta_t/\gamma$ stwierdzamy, że największy wkład daje asymptotyczne zachowanie funkcji $\psi(y)$ dla dużych wartości argumentów. Kładąc $y \gg 1$, mamy iż

$$J_1^2(yv\sqrt{1-u^2}) \simeq \frac{2}{\pi} \frac{\cos^2(yv\sqrt{1-u^2} + \pi/4)}{yv\sqrt{1-u^2}}. \quad (2.57)$$

Po wstawieniu tego wyniku do równania (2.52) i zamianie szybko oscylującej funkcji $\cos^2(yv\sqrt{1-u^2} + \pi/4)$ jej średnią wartością $1/2$, otrzymujemy

$$\begin{aligned} \psi(y) &= \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{du u^2}{\sqrt{1-u^2}} \int_0^1 dv \int_0^{2\pi} d\varphi_{\mathbf{k}} \int_0^{2\pi} d\varphi_{\mathbf{q}} \times \\ &\times \sum_{\lambda, \lambda'} \mathcal{F}_{\lambda\lambda'}(\varphi_{\mathbf{q}}, u, \varphi_{\mathbf{k}}, v) \equiv \bar{g} = \text{const}. \end{aligned} \quad (2.58)$$

Innymi słowy, w wysokich temperaturach $T \gg \theta_t/\gamma$, jak należało oczekiwać, hamowanie ruchu pętli dyslokacji ma taką samą zależność temperaturową jak dyslokacja prostoliniowa i jest opisana wzorem (2.45), w którym należy tylko zamienić wielkość g wielkością \bar{g} . Ten fakt niezgodności ma proste fizyczne wytłumaczenie związane z faktem, że hamowane niezależne kawałki pętli dyslokacji mają różną orientację, a więc ze względu na anizotropię i hamowanie też będzie różne. Łatwo można sprawdzić, że \bar{g} jest po prostu średnią wartością g wziętą po wszystkich możliwych orientacjach prostoliniowej linii dyslokacji o wektorze Burgersa \mathbf{b} leżącej w płaszczyźnie pętli i poruszającej się z prędkością \mathbf{v} prostopadle do tej płaszczyzny

$$\bar{g} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi_t g(t). \quad (2.59)$$

W przypadku symetrii osiowej, gdy wielkość $\mathcal{F}_{\lambda\lambda'}$ nie zależy od φ_t , mamy $\bar{g} = g$. Jeśli zaniedbamy wpływ anizotropii, związaną nie z krzywizną ale

z orientacją poszczególnych elementów linii dyslokacji, to możemy stwierdzić, że krzywizna linii dyslokacji wpływa istotnie na dynamiczne hamowanie tylko w obszarze temperatur $T \ll \theta_t/\gamma$. Ten obszar jest wystarczająco duży tylko dla skupisk defektów punktowych (crowdionów) i dla bardzo małych pętli dyslokacji. Z tego względu w następnym podrozdziale skupimy się na rozważaniu tylko dyslokacji prostoliniowej.

2.6. Anharmoniczność w modelu Murnaghana

Wielkość g może być określona w przybliżeniu izotropowym, gdy tensor A_{isp}^{jtq} , zgodnie z [37], ma następującą postać

$$\begin{aligned}
A_{isp}^{jtq} = & 2 \left(\frac{5}{3} \mu + \frac{1}{2} K + m - l \right) \delta_{ij} \delta_{si} \delta_{pq} \\
& - \left(\frac{\mu}{3} + K + m \right) \delta_{is} \delta_{jt} \delta_{pq} \\
& - (\mu + m) \delta_{it} \delta_{js} \delta_{pq} \\
& - 2 \left(\frac{4}{3} \mu + K + m \right) (\delta_{ij} \delta_{sp} \delta_{tq} + \delta_{st} \delta_{ip} \delta_{jq}) \\
& - 2 \mu \delta_{is} \delta_{jp} \delta_{tq} \\
& - 2 \left(\mu + \frac{1}{4} n \right) (\varepsilon_{pis} \varepsilon_{qjt} + \varepsilon_{pit} \varepsilon_{qjs}).
\end{aligned} \tag{2.60}$$

Tutaj K – objętościowy moduł sprężystości, n , m i l – moduły Murnaghana, ε_{ijk} – tensor Ricci’ego. Do dalszych obliczeń będzie nam jeszcze potrzebna izotropowa postać tensora $S_{ijkl}^*(\boldsymbol{\kappa})$

$$\begin{aligned}
S_{ijkl}^*(\boldsymbol{\kappa}) = & \frac{1}{1 - \nu} [m_i m_j m_k m_l + t_i t_j t_k t_l + \nu(m_i m_j t_k t_l + t_i t_j m_k m_l)] \\
& + \frac{1}{2} [m_i t_j t_k m_l + m_i t_j m_k t_l + t_i m_j t_k m_l + t_i m_j m_k t_l] \\
& - \frac{\nu}{1 - \nu} \delta_{ij} [m_k t_l + t_k m_l].
\end{aligned} \tag{2.61}$$

Tutaj ν – współczynnik Poissona, a \mathbf{m} i \mathbf{t} – wektory tworzące wraz z $\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{q}/q$ prawoskrętną trójkę wektorów. Wektor \mathbf{t} jest skierowany wzdłuż linii dyslokacji (rys. 2.2).

Po uwzględnieniu jawnej postaci tensora S_{ijkl}^* w równaniu (2.61), otrzymujemy, że dla dyslokacji śrubowej z wektorem Burgersa $\mathbf{b} = b \mathbf{t}$

$$S_{pqkl}^*(\boldsymbol{\kappa}) b_k m_l = \frac{b}{2} [m_p t_q + t_p m_q], \quad (2.62)$$

a dla dyslokacji krawędziowej z wektorem Burgersa $\mathbf{b} = b \boldsymbol{\tau}$

$$S_{pqkl}^*(\boldsymbol{\kappa}) b_k m_l = \frac{b(\boldsymbol{\kappa} \mathbf{n})}{1 - \nu} [\nu (\delta_{pq} - t_p t_q) - m_p m_q]. \quad (2.63)$$

Jeśli podstawimy teraz wyrażenia (2.60), (2.62) i (2.63) do równania (2.38), to otrzymamy jawną postać wielkości $\mathcal{F}_{\alpha\beta}$, bezpośrednio definiującą parametr g w równaniu (2.44). Jako przykład, dla dyslokacji śrubowej, po zaniechaniu wkładu pochodzącego od fononów podłużnych, mamy iż

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{\alpha\beta} = & \left[(\mathbf{l}_\alpha \mathbf{l}_\beta) [(\boldsymbol{\kappa}_\alpha \mathbf{m})(\boldsymbol{\kappa}_\beta \mathbf{t}) + (\boldsymbol{\kappa}_\alpha \mathbf{t})(\boldsymbol{\kappa}_\beta \mathbf{m})] + \left(1 + \frac{n}{4\mu}\right) \times \right. \\ & [(\mathbf{l}_\alpha \mathbf{l}_\beta \mathbf{t})(\boldsymbol{\kappa}_\alpha \boldsymbol{\kappa}_\beta \mathbf{m}) + (\mathbf{l}_\alpha \mathbf{l}_\beta \mathbf{m})(\boldsymbol{\kappa}_\alpha \boldsymbol{\kappa}_\beta \mathbf{t}) + \\ & \left. (\mathbf{l}_\alpha \boldsymbol{\kappa}_\beta \mathbf{t})(\boldsymbol{\kappa}_\alpha \mathbf{l}_\beta \mathbf{m}) + (\mathbf{l}_\alpha \boldsymbol{\kappa}_\beta \mathbf{m})(\boldsymbol{\kappa}_\alpha \mathbf{l}_\beta \mathbf{t}) \right]^2, \end{aligned} \quad (2.64)$$

gdzie $\boldsymbol{\kappa}_\alpha = \mathbf{k}/k$, $\boldsymbol{\kappa}_\beta = \mathbf{k}'/k'$, a mieszany iloczyn wektorowy jest postaci

$$(\mathbf{A} \mathbf{B} \mathbf{C}) = \mathbf{A}(\mathbf{B} \times \mathbf{C}). \quad (2.65)$$

Kolejny krok polega na wyrażeniu wielkości $\mathcal{F}_{\alpha\beta}$ we współrzędnych biegunowych (2.40) i obliczeniu potrójnej całki (2.44). Obliczenia są czasochłonne i żmudne, więc podamy tu tylko ostateczne wyniki.

Podobne oszacowanie dla dyslokacji śrubowej były robione w pracy [3]. Zgodnie z tą pracą

$$g_s \simeq 4 + \left(\frac{n}{\mu} + 6\right)^2. \quad (2.66)$$

Wynik dla dyslokacji krawędziowej jest dużo bardziej skomplikowany i po raz pierwszy został opublikowany w pracy [14]

$$g_{ed} \simeq \frac{1}{\mu^2} \left(\frac{1-2\nu}{1-\nu} \right)^2 (16.49m^2 + 0.76n^2 - 4.94mn + 13.34K^2 + 55.5\mu^2 + 23.54Km - 3.85Kn + 4.86\mu n + 30.33\mu m + 5.78k\mu) + \frac{1}{\mu^2(1-\nu)^2} (0.63n^2 + 17.41\mu^2 + 5.93\mu n). \quad (2.67)$$

Na ogół największy wkład zarówno do g_{ed} jak i do g_s pochodzi od członów zawierających stałą Murnaghana n . Na przykład, dla miedzi, zgodnie z pracą [133] mamy, iż

$$\begin{aligned} n &= -159 \cdot 10^{11} \text{ dyna/cm}^2, & m &= -62 \cdot 10^{11} \text{ dyna/cm}^2, \\ \mu &= 5.46 \cdot 10^{11} \text{ dyna/cm}^2, & \nu &= 0.324, \end{aligned} \quad (2.68)$$

$$K = \frac{2\mu(1+2\nu)}{3(1-2\nu)} = 17.042 \cdot 10^{11} \text{ dyna/cm}^2.$$

Tak więc

$$g_s \simeq 538, \quad g_{ed} \simeq 931, \quad (2.69)$$

a wielkość n daje ponad 80% wkładu do wielkości g .

Tak więc, korzystając z równań (2.45), (2.66) i (2.67) możemy oszacować wpływ wiatru fononowego na hamowanie ruchu dyslokacji śrubowej i krawędziowej w niskich temperaturach. W obszarze wysokich temperatur przedstawione powyżej oszacowanie nie jest prawidłowe, ponieważ pominięto wpływ jądra dyslokacji, co w tym przypadku jest istotne. Brak ten zostanie uzupełniony w następnym podrozdziale.

2.7. Wiatr fononowy w wysokich temperaturach

Jak wspomniano już powyżej, w tym podrozdziale przedyskutujemy zachowanie się sprężystego pola w pobliżu jądra dyslokacji w niezbyt niskich temperaturach, gdy długość fali fononów jest porównywalna ze średnicą jądra dyslokacji. W teorii kontynualnej dyslokacja jest traktowana jako

liniowa osobliwość rzędu $1/r$ i w tym przybliżeniu pole sprężyste wraz ze zbliżaniem się do jądra dyslokacji wzrasta do nieskończoności. Jest więc oczywiste, że podejście kontynualne nie może być bezpośrednio stosowane do opisu dyskretnej struktury rzeczywistych kryształów, a w każdym razie na pewno nie w pobliżu jądra dyslokacji, gdzie ma miejsce relaksacja pola sprężystego. Można natomiast uwzględnić istnienie jądra dyslokacji modelując je poprzez obcięcie w gładki sposób pola sprężystego przy zbliżaniu się do linii dyslokacji. Tutaj zastosujemy model zaproponowany przez Lothe [91]

$$u_{ij}(\mathbf{r}) = u_{ij}^c(\mathbf{r}) (1 - e^{-r/r_0}), \quad (2.70)$$

gdzie $u_{ij}^c(\mathbf{r})$ – tensor sprężystych deformacji w przybliżeniu kontynualnym ($u_{ij}^c \sim b/(2\pi r)$). Promień jądra dyslokacji r_0 przyjmowany w tym modelu wynosi kilka stałych sieciowych.

Można pokazać, że polu sprężystemu (2.70) (w przypadku izotropowym) odpowiada transformata Fouriera

$$\hat{u}_{ij}(\mathbf{q}) = \frac{\hat{u}_{ij}^c(\mathbf{q})}{\sqrt{1 + (\mathbf{q}\mathbf{r}_0)^2}}, \quad (2.71)$$

gdzie $\hat{u}_{ij}^c(\mathbf{q})$ – transformata Fouriera tensora $u_{ij}^c(\mathbf{r})$.

Rozpatrzmy jako przykład prostoliniową dyslokację śrubową równoległą do osi $0x$, dla której

$$u_{ij}^c(\mathbf{r}) = \begin{Bmatrix} u_{zx} \\ u_{zy} \end{Bmatrix} = \frac{b}{2\pi r} \begin{Bmatrix} -\sin \varphi \\ \cos \varphi \end{Bmatrix}, \quad u_{ij}^c(\mathbf{q}) = \frac{ib}{2q} \begin{Bmatrix} -\sin \varphi_{\mathbf{q}} \\ \cos \varphi_{\mathbf{q}} \end{Bmatrix}, \quad (2.72)$$

a kąty φ i $\varphi_{\mathbf{q}}$ są mierzone od osi $0x$. Po uwzględnieniu równania (2.72), transformata Fouriera (2.70) wynosi

$$\begin{aligned} \hat{u}_{ij}(\mathbf{q}) &= \frac{b}{2\pi} \int_0^\infty dr (1 - e^{-r/r_0}) \int_0^{2\pi} d\varphi e^{iqz \cos(\varphi - \varphi_{\mathbf{q}})} \begin{Bmatrix} -\sin \varphi \\ \cos \varphi \end{Bmatrix} \\ &= \frac{ib}{2q} \begin{Bmatrix} -\sin \varphi_{\mathbf{q}} \\ \cos \varphi_{\mathbf{q}} \end{Bmatrix} \int_0^\infty du (1 - e^{-u/(q\mathbf{r}_0)}) J_1(u) = \frac{\hat{u}_{ij}^c(\mathbf{q})}{\sqrt{1 + (\mathbf{q}\mathbf{r}_0)^2}}. \end{aligned} \quad (2.73)$$

W bardzo podobny sposób można wyprowadzić analogiczne wyrażenie dla dyslokacji krawędziowej. We współrzędnych sferycznych tensor $u_{ij}^c(\mathbf{r})$ ma postać

$$u_{ij}(\mathbf{r}) = \begin{Bmatrix} u_{rr} \\ u_{\varphi\varphi} \\ u_{r\varphi} \end{Bmatrix} = -\frac{b}{4\pi r} \frac{1-2\nu}{1-\nu} \begin{Bmatrix} -\sin\varphi \\ \cos\varphi \\ -\frac{\cos\varphi}{1-2\nu} \end{Bmatrix}. \quad (2.74)$$

Prosta postać czynnika normującego tensor $\hat{u}_{ij}^c(\mathbf{q})$ w równaniu (2.71) i wyniki otrzymane w poprzednim podrozdziale pozwalają teraz na otrzymanie zmodyfikowanego oszacowania wpływu wiatru fononowego na hamowanie ruchu dyslokacji bez żmudnych obliczeń parametru g . Łatwo widać, że po podstawieniu równania (2.71) do równania (2.24) otrzymujemy wyrażenie (2.41) z tą tylko różnicą, że wyrażenie podcałkowe jest mnożone przez $[1 + (r_0 \omega_{\mathbf{q}}/c_t)^2]^{-1}$. Ostateczne oszacowanie współczynnika hamowania ma postać podobną do (2.45)

$$B = g \frac{\hbar}{b^3} \left(\frac{k_D b}{2\pi} \right)^5 f_\chi(T/\theta_t), \quad (2.75)$$

gdzie współczynnik g jest dany przez wyrażenie (2.44). Oszacowania (2.66) i (2.67) wielkości g odpowiednio dla dyslokacji śrubowej i krawędziowej są tu również poprawne. Jedyna różnica pomiędzy równaniami (2.75) i (2.45) polega tylko na różnej postaci funkcji $f_\chi(T/\theta_t)$ opisującej zależność temperaturową badanego efektu. Teraz

$$f_\chi(x) = x^5 \int_0^{1/x} \frac{e^t t^5 dt}{(e^t - 1)^2} \frac{\arctan(\chi x t)}{\chi x t}, \quad (2.76)$$

gdzie $\chi = 2k_D r_0$. Podobna modyfikacja zależności temperaturowej wiatru fononowego była pokazana po raz pierwszy w pracy [9].

Dodatkowy czynnik

$$\frac{\arctan(\chi x t)}{(\chi x t)}$$

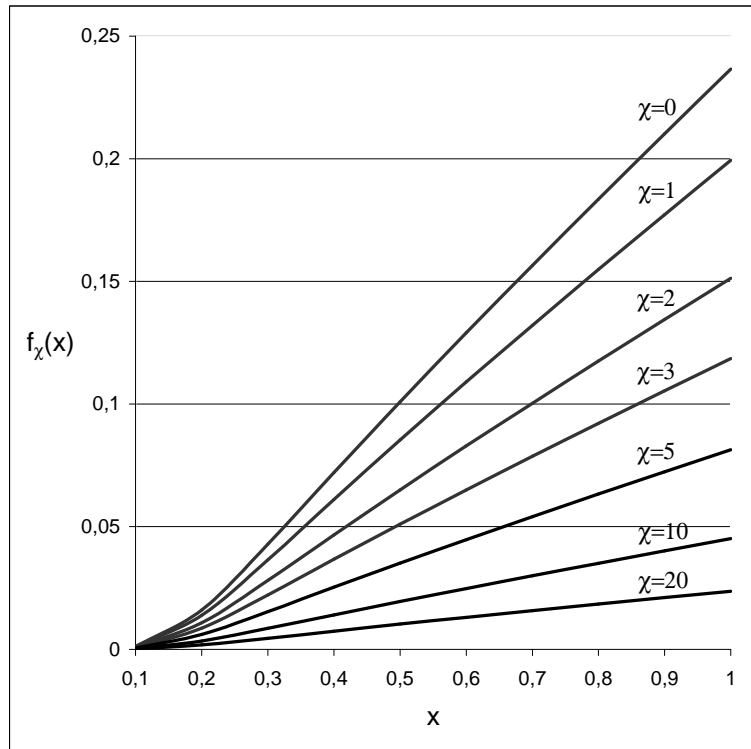
w równaniu (2.76) (w porównaniu z równaniem (2.46)) opisuje gładkie obcięcie pola sprężystego na jądrze dyslokacji. W punkcie $r_0 = 0$ czynnik ten jest równy jedności, a funkcja $f_\chi(x)$ przyjmuje swą poprzednią postać.

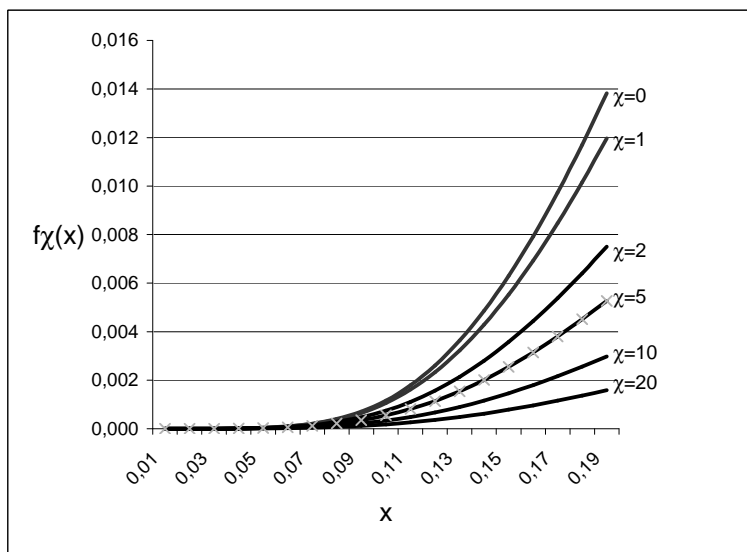
Jak należało oczekiwać, w niskich temperaturach $T \ll \theta_t/\chi$, renormalizacja nie ma istotnego znaczenia, gdyż główny wkład do całki dają wartości $t \sim 1$, a wtedy $\chi x t \ll 1$ i $\arctan(\chi x t) \simeq \chi x t$. Jest to odbiciem faktu, że fonony długofalowe, przeważające w niskich temperaturach, są słabo odczuwalne na odległościach mniejszych od ich długości fali.

Wraz ze wzrostem temperatury, funkcja $f_\chi(x)$ stosunkowo szybko przechodzi od zależności typu x^5 do zależności liniowej z nachyleniem zależnym od parametru χ :

$$f_\chi(x) \simeq \frac{x}{3\chi} \left[\arctan \chi - \frac{\chi^2 - \ln(\chi^2 + 1)}{2\chi^3} \right] \simeq \begin{cases} x/4, & \chi \ll 1, \\ x/(2\chi), & \chi \gg 1. \end{cases} \quad (2.77)$$

Przy zwykłych oszacowaniach wartości wielkości k_D i $r_0 \sim (1 \div 3)b$, wielkość χ jest rzędu $(10 \div 30)$. Jak to wynika ze wzoru (2.77), uwzględnienie skończonych rozmiarów jądra dyslokacji w wysokich temperaturach $T > \theta_t$ prowadzi do wzrostu oszacowanego wpływu wiatru fononowego na dyssypację o czynnik $\chi/2 = k_D r_0$, czyli blisko o jeden rząd wielkości. Na rysunku 2.3 pokazano funkcję $f_\chi(x)$ dla różnych wartości χ . Warto zauważyć, że stosunek $f_\chi(x)/f_\chi(1)$ bardzo słabo zależy od wartości parametru χ aż do bardzo niskich temperatur. Fakt ten znacząco ułatwia procedurę analizy teoretycznej danych doświadczalnych (patrz na przykład prace [3] i [9]). Zauważmy w związku z powyższymi rozważaniami, że nasze oszacowania na podstawie równania (2.75) w temperaturze pokojowej dają wartości współczynnika hamowniania B porównywalne z wartościami mierzonymi. Niemniej, nie przytaczamy tu tych porównań, gdyż w wysokich temperaturach należy również uwzględnić relaksację tak zwanych „powolnych” fononów ([3], [9]), a tym zagadnieniem tu się nie zajmowaliśmy.

Rys. 2.3. Wykres funkcji $f_\chi(x)$ dla różnych wartości χ [14]

Rys. 2.4. Wykres funkcji $f_\chi(x)$ dla różnych wartości χ dla małych wartości x

Rozdział 3

Dyfuzja

Problemy związane z teoretycznym opisem dyfuzji oraz innych procesów i zjawisk jej towarzyszących, a w szczególności zjawiska dyfuzji defektów punktowych w ciałach stałych, zajmują uwagę badaczy już od wielu dziesiętków lat. Dyfuzja w pewnych szczególnych sytuacjach w istotny sposób wpływa na elektromechaniczne właściwości materiałów (np. w półprzewodnikach), ma więc bardzo ważne znaczenie w wielu gałęziach przemysłu zajmujących się produkcją materiałów o zadanych właściwościach.

Ciała stałe mają w większości przypadków strukturę polikrystaliczną, więc dyfuzja może zachodzić albo powierzchniowo po granicy ziaren, albo objętościowo wewnątrz ziaren. O prędkości przebiegu dyfuzji w danym materiale decyduje współczynnik dyfuzji D , który często jest obliczany z empirycznego wzoru Arrheniusa [99]

$$D(T) = D_0 \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right), \quad (3.1)$$

gdzie D_0 – pewna stała, E_a – energia aktywacji, k – stała Boltzmanna, T – temperatura bezwzględna. Energia aktywacji dyfuzji sieciowej (wewnątrz ziarna) jest znacznie większa od energii aktywacji dyfuzji międzyziarnowej, istnieje więc taka temperatura, dla której wielkości odpowiednich współczynników dyfuzji stają się porównywalne. Wielkość tej temperatury, na ogół rzędu 2/3 bezwzględnej temperatury topnienia danej substancji, jest znana w literaturze jako temperatura Tammanna.

Ze względu na skomplikowaną strukturę granic, nie ma jeszcze dobrej teorii dyfuzji międzyziarnowej, natomiast dyfuzja sieciowa jest dużo lepiej rozpracowana. Mrowec, w swej monografii na temat dyfuzji w ciałach stałych [99], wyróżnia dziesięć mechanizmów dyfuzji sieciowej, przy czym naj-

częściej spotykanym jest mechanizm wakansyjny. Polega on na kolejnych przeskokach atomu z węzła sieci do sąsiadującej z nim wakansji. Powoduje to przemieszczenie się wakansji w kierunku przeciwnym do ruchu przeskakującego atomu. Można by więc rozpatrywać dyfuzję wakansyjną albo jako ruch atomów, albo jako ruch wakansji, jednakże jak się okazuje, współczynniki dyfuzji wakansji i atomów nie są sobie równe [99]. Jest to efekt czysto geometryczny. Prześledzimy to na przykładzie sieci bcc (sieci sześcienniej centrowanej objętościowo). W 1 cm^3 znajduje się $\sim 10^{24}$ komórek elementarnych, natomiast średnia gęstość defektów punktowych jest rzędu $\sim 10^{15}/\text{cm}^3$. Tak więc, z punktu widzenia sieci krystalicznej duża część kryształu jest pozbawiona defektów. Migracja atomów i wakansji poprzez kryształ jest ściśle związana z sąsiedztwem z defektami sieci oraz z prawdopodobieństwo przeskoku atomu w sąsiednią pozycję międzywęzłową i zależy w znacznym stopniu od gęstości defektów. Można więc przyjąć za [99], że współczynnik samodyfuzji D jest dany w postaci

$$D = \alpha a_0^2 \omega \frac{n_d}{n_w}, \quad (3.2)$$

gdzie α – współczynnik zależny od struktury kryształu i mechanizmu dyfuzji, a_0 – stała rzędu stałej sieci, ω – częstość przeskoków, n_d i n_w – liczba defektów i liczba atomów w położeniach węzłowych na jednostkę objętości. Współczynnik geometryczny α ma postać

$$\alpha = \frac{1}{6} Z A^2, \quad (3.3)$$

gdzie A – pewien współczynnik proporcjonalności, Z – liczba najbliższych położeń w kryształach, do których może nastąpić przeskok.

W przypadku dyfuzji wakansyjnej w sieci bcc każdy atom ma 8 możliwości przeskoku do najbliższych równoważnych położeń, czyli $Z = 8$, a droga przeskoku S wynosi

$$S = \frac{\sqrt{3}}{2} a_0. \quad (3.4)$$

W tej samej strukturze w przypadku dyfuzji międzywęzłowej, każdy atom domieszki w położeniu międzywęzłowej może przeskoczyć tylko w 4 położenia oktaedryczne, a więc $Z = 4$, a droga przeskoku wynosi

$$S = \frac{1}{2} a_0. \quad (3.5)$$

Innym typem dyfuzji związanym z wakansjami jest dyfuzja relaksacyjna. Zjawisko to polega na przesunięciu atomów w kierunku wakansji w celu zapelnienia powstałej pustki. Efekt ten może obejmować równocześnie wiele atomów. W rezultacie pojawia się pewne rozluźnienie struktury krystalicznej, przypominające punktowe nadtopienie się materiału. Tak więc lokalnie atomy mogą dyfundować podobnie jak w fazie ciekłej pod wpływem chaotycznych drgań atomów w wyniku pobudzenia termicznego. Inne, relatywnie niskoenergetyczne typy dyfuzji sieciowej, to samoistna dyfuzja atomów do przestrzeni międzywęzłowej (np. w międzywęzłowych roztworach wodoru lub węgla w metalach) lub z wypieraniem do przestrzeni międzywęzłowej jednych atomów kryształu przez inne.

Jak z powyższego widać, w licznych przypadkach dyfuzję można rozpatrywać jako wynik losowego ruchu atomów lub cząsteczek [51]. Ale widać również, że dyfundujące atomy na ogół nie przemieszczają się czysto chaotycznie w dowolnych kierunkach, jak ma to miejsce w ruchach brownowskich. Istnieje więc potrzeba zbudowania teorii dyfuzji, która by ją opisywała w sposób bardziej zbliżony do jej rzeczywistego przebiegu.

Inspiracją do naszych rozważań były, między innymi, prace dotyczące stochastycznego kwantowania [53], [106]. W pracach tych podjęto próbę uzasadnienia mechaniki kwantowej w ramach mechaniki statystycznej, a w szczególności zaproponowano interpretację poprzez procesy dyfuzyjne równania Schrödingera

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \Delta \psi + V \psi, \quad (3.6)$$

gdzie \hbar – stała Plancka, $\psi = \psi(x, t)$ – funkcja falowa, m – masa cząstki elementarnej, $V = V(x)$ – potencjał.

3.1. Procesy Markova

Jednym z modeli matematycznych, stosunkowo dobrze opisujących losowy ruch dyfundujących molekuł w obecności pola sił zewnętrznych, jest dyfuzyjny proces Markova (patrz na przykład [54], [138]). Tu ograniczymy się do dyfuzyjnego procesu Markova zdefiniowanego przez równanie Ito w postaci

$$d\mathbf{x} = \mathbf{b}(\mathbf{x}, t) dt + d\mathbf{W}(t), \quad (3.7)$$

gdzie $\mathbf{W} = \mathbf{W}(t)$ jest procesem Wienera w \mathbb{R}^3 , czyli jest jednorodnym procesem Gaussa z niezależnymi przyrostami, dla którego

$$\begin{aligned} \mathbf{W}(0) &= \mathbf{0}, \quad E[\mathbf{W}(t)] = \mathbf{0}, \\ E[\mathbf{W}(t) \otimes \mathbf{W}(t)] &= \sigma^2 t \mathbf{I}, \quad t \geq 0, \sigma^2 > 0. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Tutaj E – operator wartości oczekiwanej, σ^2 – wariancja zmiennej losowej dyfuzyjnego procesu Markova, \mathbf{I} – macierz jednostkowa. Mamy więc

$$\begin{aligned} E_{\mathbf{x}(t)}[d\mathbf{x}(t)] &= \mathbf{b}(\mathbf{x}, t)dt, \\ E_{\mathbf{x}(t)}[(d\mathbf{x}(t) - \mathbf{b}(\mathbf{x}, t)dt) \otimes (d\mathbf{x}(t) - \mathbf{b}(\mathbf{x}, t)dt)] &= \sigma^2 t \mathbf{I}, \end{aligned} \quad (3.9)$$

gdzie $E_{\mathbf{x}(t)}$ – warunkowy operator wartości oczekiwanej. Równanie (3.9) oznacza, że rozwiązanie $\mathbf{x}(t)$ stochastycznego równania Ito (3.7) dla $t \geq 0$ jest procesem losowym w \mathbb{R}^3 oraz że jest stochastycznie jednorodne i izotropowe. Składowe $x_i(t)$, $i = 1, 2, 3$, dla $t \geq 0$, w ortonormalnych współrzędnych kartezjańskich w \mathbb{R}^3 są nieskorelowanymi zmiennymi losowymi. Prawdopodobieństwo $P(\mathbf{x}(t) \in \mathcal{P})$ istnienia trajektorii (rozwiązania) równania Ito przecinającej zbiór $\mathcal{P} \subset \mathbb{R}^3$ w chwili t i w punkcie \mathbf{x} wynosi

$$P(\mathbf{x}(t) \in \mathcal{P}) = \int_{\mathcal{P}} p(\mathbf{x}, t) dV(\mathbf{x}), \quad (3.10)$$

gdzie gęstość prawdopodobieństwa $p(\mathbf{x}, t)$ spełnia równanie Fokkera - Plancka [53]

$$\partial_t p = \frac{1}{2} \sigma^2 \Delta p - \text{div}(p \mathbf{b}). \quad (3.11)$$

W teorii dyfuzji zakłada się, że gęstość prawdopodobieństwa $p(\mathbf{x}, t)$ związana jest z koncentracją objętościową $n(\mathbf{x}, t)$ dyfundujących atomów poprzez równanie

$$p(\mathbf{x}, t) = \frac{n(\mathbf{x}, t)}{N(t)}. \quad (3.12)$$

Nie będziemy tu rozpatrywać zagadnień brzegowych, gdyż nasze rozważania będą dotyczyć tylko ciał nieskończonych. W procesie dyfuzji, w każdej chwili czasu $t \geq 0$, bierze udział bardzo duża, ale skończona liczba atomów

$$N(t) = \int_{\mathbb{R}^3} n(\mathbf{x}, t) dV(\mathbf{x}) < \infty. \quad (3.13)$$

Zakładamy, że wzajemne oddziaływania dyfundujących atomów są pomijalnie małe. To założenie jest czynione stosunkowo często, np. w sytuacjach, gdy rozważa się niewielkie koncentracje dyfundujących atomów. Warunek (3.13) jest równoważny żądaniu normalizacji miary probabilistycznej

$$P((\mathbf{x}, t) \in \mathbb{R}^3) = 1. \quad (3.14)$$

Okazuje się [107], że przy odpowiednich założeniach o funkcji $\mathbf{b}(\mathbf{x}, t)$, rozwiązania równania (3.7) z warunkiem początkowym $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^3$ istnieją, są ciągłe i są zdefiniowane jednoznacznie z prawdopodobieństwem 1. Jednakże w wielu ważnych przypadkach rozwiązanie (\mathbf{x}, t) nie jest różniczkowalne¹. Potrzebna jest więc nowa definicja różniczkowania, którą przytoczymy za Nelsonem [106].

Niech $f = f(\mathbf{x}, t)$ będzie gładką funkcją skalarną lub wektorową. Oznaczmy przez D_+ i D_- operatory różniczkowania stochastycznego wzdłuż trajektorii równania Ito $\mathbf{x}(t)$ dla $t \geq 0$, zdefiniowane następująco:

$$\begin{aligned} D_+ f(\mathbf{x}, t) &= \lim_{h \rightarrow 0_+} E_{\mathbf{x}(t)} \left[\frac{1}{h} \{f(\mathbf{x}(t+h), t+h) - f(\mathbf{x}(t), t)\} \right], \\ D_- f(\mathbf{x}, t) &= \lim_{h \rightarrow 0_-} E_{\mathbf{x}(t)} \left[\frac{1}{h} \{f(\mathbf{x}(t), t) - f(\mathbf{x}(t-h), t-h)\} \right]. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Tak więc w naszym przypadku

$$\begin{aligned} D_+ &= \partial_t + \mathbf{b}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla + \frac{\sigma^2}{2} \Delta, \\ D_- &= \partial_t + \mathbf{b}_*(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla + \frac{\sigma^2}{2} \Delta, \end{aligned} \quad (3.16)$$

gdzie

$$\mathbf{b}_* = \mathbf{b} - \sigma^2 \frac{\nabla p(\mathbf{x}, t)}{p(\mathbf{x}, t)}. \quad (3.17)$$

Dla trajektorii równania Ito mamy

$$\begin{aligned} D_+ \mathbf{x}(t) &= \mathbf{b}(\mathbf{x}(t), t), \\ D_- \mathbf{x}(t) &= \mathbf{b}_*(\mathbf{x}(t), t). \end{aligned} \quad (3.18)$$

¹ W tym kontekście należy zwrócić uwagę na badania dotyczące formowania się w wyniku procesu dyfuzji klastrów, których brzeg ma charakter fraktalny (patrz np. [64] i inne prace w tym tomie).

Operatory D_+ i D_- reprezentują odpowiednio przyszłość i przeszłość dyfuzyjnego procesu Markova. W szczególności, w każdej chwili t istnieją dwie średnie prędkości wędrującego atomu:

- i. prędkość \mathbf{b}_* z jaką atom dociera do punktu \mathbf{x} (porównaj (3.18)_b);
- ii. prędkość \mathbf{b} z jaką atom opuszcza punkt \mathbf{x} (porównaj (3.18)_a).

W równaniu Ito i w równaniu Fokkera-Plancka pojawia się wielkość \mathbf{b} .

Wprowadźmy oznaczenia:

$$\begin{aligned}\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) &= \frac{1}{2} [\mathbf{b}_*(\mathbf{x}, t) + \mathbf{b}(\mathbf{x}, t)] , \\ \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) &= \frac{1}{2} [\mathbf{b}_*(\mathbf{x}, t) - \mathbf{b}(\mathbf{x}, t)] .\end{aligned}\tag{3.19}$$

W rozważanym przez nas przypadku otrzymamy:

$$\mathbf{u} = -\sigma^2 \frac{\nabla p}{2p} = \mathbf{v} - \mathbf{b} .\tag{3.20}$$

W literaturze dotyczącej klasycznej teorii dyfuzji, prędkość $\mathbf{b}(\mathbf{x}, t)$ nazywana jest prędkością średnią, a prędkość $\mathbf{b}_*(\mathbf{x}, t)$ nie jest rozważana. W teorii mieszanin rozpatruje się prędkości analogiczne do prędkości \mathbf{v} i \mathbf{u} . Nazywa się je odpowiednio prędkością szczególną (peculiar velocity) i prędkością dyfuzji [143]. W literaturze dotyczącej teorii stochastycznego kwantowania (np. [107]) rozpatrywany jest nie wektor \mathbf{u} , ale wektor $-\mathbf{u}$, noszący nazwę prędkości osmotycznej. Tu będziemy stosowali terminologię z teorii mieszanin.

Ze stochastycznym równaniem Ito (3.7) można powiązać operator średniej drugiej pochodnej A [53], [106], [107]:

$$A \mathbf{x}(t) = \frac{1}{2} (D_+ D_- + D_- D_+) (\mathbf{x}(t)) .\tag{3.21}$$

Operator ten jest niezmienniczy względem operacji symetrii $t \rightarrow -t$. Z równań (3.16), (3.19) i (3.21) wynika, że wzdłuż trajektorii równania Ito

$$A \mathbf{x}(t) = \mathbf{a}(\mathbf{x}(t), t) ,\tag{3.22}$$

gdzie

$$\mathbf{a} = \partial_t \mathbf{v} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} - (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \frac{1}{2} \sigma^2 \Delta \mathbf{u} .\tag{3.23}$$

Pole $\mathbf{a}(\mathbf{x}(t), t)$ dla $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$ i dla $t \geq 0$, nazywane jest szczególnym przyspieszeniem (peculiar acceleration) w dyfuzyjnym procesie Markova.

3.2. Makroskopowa interpretacja równania Fokkera-Plancka

W klasycznym sformułowaniu teorii dyfuzji zakłada się, że średnia prędkość $\mathbf{b}(\mathbf{x}, t)$ jest definiowana poprzez siłę $\mathbf{F}(\mathbf{x}, t)$ działającą na dyfundujący atom zgodnie z prawem Stokesa

$$\mathbf{F} = \zeta \mathbf{b}, \quad (3.24)$$

gdzie współczynnik $1/\zeta$ jest nazywany ruchliwością atomu. Z równania Fokkera-Plancka (3.11) wynika, że stacjonarny rozkład prawdopodobieństwa $p = p(\mathbf{x})$, taki że

$$\lim_{|\mathbf{x}| \rightarrow \infty} p(\mathbf{x}) = 0, \quad (3.25)$$

przyjmuje postać [63]

$$p(\mathbf{x}) = C \exp\left(\frac{-2U_0(\mathbf{x})}{\zeta\sigma^2}\right). \quad (3.26)$$

Aby ten rozkład prawdopodobieństwa opisywał stan równowagi termodynamicznej z potencjałem $U_0(\mathbf{x})$ w temperaturze bezwzględnej T , to musi to być on rozkładem Boltzmanna, a więc musi zachodzić równość

$$\frac{2}{\zeta\sigma^2} = \frac{1}{kT}, \quad (3.27)$$

lub równoważnie

$$\sigma^2 = 2D, \quad (3.28)$$

gdzie

$$D = \frac{kT}{\zeta}, \quad (3.29)$$

k – stała Boltzmanna. Równanie (3.29) nosi nazwę relacji Einsteina i łączy współczynnik samodyfuzji D z ruchliwością dyfundującego atomu.

Uogólnijmy teraz równanie (3.28) opisujące związek parametru wariancji σ^2 ze współczynnikiem dyfuzji D . Załóżmy mianowicie, że jest on prawdziwy dla każdego procesu dyfuzji, który może być potraktowany jako losowy ruch atomów opisany przez równanie Ito (3.7). W szczególności, będziemy posługiwać się równaniem (3.28) również w sytuacji, gdy nie jest

prawdziwa relacja Stokes'a (3.24) (porównaj równanie (3.38) na stronie 99).

Wykorzystując równania (3.12) i (3.28), możemy zapisać równanie Fokkera-Plancka (3.11) w następującej postaci

$$\partial_t n = D \Delta n - \operatorname{div}(n \mathbf{b}) + \beta(t)n, \quad (3.30)$$

gdzie $\beta(t)$, dla $t \geq 0$, opisuje prędkość zmian całkowitej liczby dyfundujących atomów

$$\beta(t) = \frac{\dot{N}(t)}{N(t)}. \quad (3.31)$$

Równanie (3.30) jest równaniem dyfuzji ze źródłami dla ciał izotropowych. Wpływ pól zewnętrznych na proces dyfuzji jest opisywany przez funkcję $\mathbf{b} = \mathbf{b}(\mathbf{x}, t)$. Współczynnik D traktujemy jako pewien fenomenologiczny parametr. Jego końcową postać można ustalić dla każdego konkretnego przypadku na podstawie rozważań mikrostrukturalnych lub otrzymać z doświadczenia. Na przykład, w sytuacjach, kiedy dyfuzja jest wywołana termofluktuacjami atomów międzywęzłowych, a przeskoki z jednej pozycji międzywęzłowej do innej możliwe są po pokonaniu odpowiedniej bariery energetycznej, współczynnik D może być oszacowany ze wzoru Arrheniusa (3.1) i gdzie zakłada się, że współczynniki D_0 i E_a nie zależą od temperatury T . W przypadku dyfuzji chemicznej zachodzącej w stopach binarnych o sieci kubicznej i z małą koncentracją atomów międzywęzłowych [136], gdy mogą być zanedbane oddziaływania pomiędzy dyfundującymi atomami, mamy

$$D_0 = \frac{A_0 a^2}{\tau_0}. \quad (3.32)$$

Tutaj a – stała kubicznej sieci krystalicznej, A_0 – współczynnik zależny od geometrycznych właściwości rozkładu cząsteczek (atomów) międzywęzłowych, τ_0 – stała o wymiarze czasu i o wartościach równych odwrotności częstości drgań atomów w położeniach międzywęzłowych, czyli około 10^{-13} sek. Można przyjąć w przybliżeniu, że $D_0 = 10^{-2} \div 10^0$ cm²/sek. E_0 to energia aktywacji procesu dyfuzji, definiowana jako energia sprężysta potrzebna do rozsunięcia atomów sieci krystalicznej przez atom międzywęzłowy w temperaturze zera bezwzględnego. Dla większości metali $E_a/kT_m = 17 \div 19$, gdzie T_m – temperatura topnienia [33].

3.3. Dyfuzja jako ruch Nelsona-Browna

Wykorzystując wyniki poprzedniego podrozdziału, rozważymy teraz proces dyfuzji opisywany przez równanie ewolucji gęstości masy w postaci

$$\partial_t \rho = D \Delta \rho - \operatorname{div}(\rho \mathbf{b}) + \beta(t)\rho, \quad (3.33)$$

(porównaj równanie (3.30)). Oznaczmy przez $M(t)$ masę dyfundujących atomów (porównaj równania (3.13) i (3.31))

$$M(t) = \int_{\mathbb{R}^3} \rho(\mathbf{x}, t) dV(\mathbf{x}) = M_0 \exp \left[\int_0^t \beta(s) ds \right], \quad (3.34)$$

gdzie $\rho(\mathbf{x}, t) = m n(\mathbf{x}, t)$, a $M_0 = M(0)$ – całkowita początkowa masa dyfundujących atomów o masie m , jeśli $n(\mathbf{x}, t)$ – ich objętościowa koncentracja.

Gdy weźmiemy pod uwagę (porównaj równania (3.12) i (3.34)), że

$$p(\mathbf{x}, t) = \frac{\rho(\mathbf{x}, t)}{M(t)}, \quad (3.35)$$

i (porównaj równania (3.17), (3.19), (3.20) i (3.28))

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = -D \frac{\nabla p(\mathbf{x}, t)}{p(\mathbf{x}, t)} = -D \nabla \ln \frac{p(\mathbf{x}, t)}{p_0}, \quad (3.36)$$

gdzie p_0 jest dowolną stałą o wymiarze $p(\mathbf{x}, t)$, to możemy przepisać równanie (3.33) w postaci równania ciągłości

$$\partial_t p + \operatorname{div}(p \mathbf{v}) = 0. \quad (3.37)$$

Rozważmy sytuację, gdy równanie Stokesa (3.24) nie zachodzi, czyli gdy siła

$$\mathbf{K}(\mathbf{x}, t) = -\zeta \mathbf{b}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{F}(\mathbf{x}, t), \quad (3.38)$$

nie znika tożsamoscowo². Współczynnik ζ to współczynnik tarcia opisujący oddziaływanie dyfundującej materii z ośrodkiem, ale nie zakładamy tu obowiązywania relacji Einsteina (3.29). Zakładamy natomiast, że

² Metoda kwantowania stochastycznego bada zachowanie się jednego atomu o masie m i przemieszczającego się bez tarcia. W takich przypadkach siła $\mathbf{F}(\mathbf{x}, t)$ jest traktowana jako siła całkowita [53], [106], [107]. Rozważane są również inne formy tej siły [111], [155].

$\mathbf{K}(\mathbf{x}, t)$ jest całkowitą siłą działającą na dyfundujący atom w obecności zewnętrznego pola. Postępując teraz zgodnie z metodyką kwantowania stochastycznego ([53], [106], [107], [111], [155]) postulujemy następującą relację pomiędzy aholonomicznym polem szczególnych przyspieszeń $\mathbf{a}(\mathbf{x}, t)$ ($\mathbf{a}(\mathbf{x}, t) \neq \ddot{\mathbf{x}}(t)$) dyfundującego atomu o masie m i polem sił $\mathbf{K}(\mathbf{x}, t)$ działających na ten atom

$$m \mathbf{a}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{K}(\mathbf{x}, t), \quad (3.39)$$

gdzie przyspieszenie $\mathbf{a}(\mathbf{x}, t)$ dla $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$ i $t \geq 0$, jest zdefiniowane przez równania (3.23) i (3.28)

$$\mathbf{a} = \partial_t \mathbf{v} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} - (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + D \Delta \mathbf{u}. \quad (3.40)$$

Związek dynamiczny określony przez równania (3.38), (3.39) i (3.40) jest nazywany *relacją Nelsona*.

Jeśli uwzględnimy teraz fakt, że pole \mathbf{u} jest polem potencjalnym (porównaj równanie (3.36)) oraz poniższe tożsamości

$$\Delta \mathbf{u} = \nabla \operatorname{div} \mathbf{u} - \operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{u}, \quad \nabla \mathbf{u}^2 = 2\mathbf{u} \nabla \mathbf{u},$$

to warunek (3.39) może być przepisany w postaci następującego równania ewolucji wektora szczególnej prędkości $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$

$$\partial_t \mathbf{v} = -\frac{1}{\tau}(\mathbf{v} - \mathbf{u}) - \nabla(D \operatorname{div} \mathbf{u} + \frac{1}{2}(\mathbf{v}^2 - \mathbf{u}^2)) + \frac{\mathbf{F}}{m}, \quad (3.41)$$

gdzie τ – stała o wymiarze czasu równa z definicji

$$\tau = \frac{m}{\zeta}. \quad (3.42)$$

W fizyce statystycznej stała τ nosi nazwę *kinetycznego czasu relaksacji*. Można pokazać, że jeśli

$$\tau_* = dt = t - t_0 > 0, \quad (3.43)$$

jest fizycznie nieskończenie krótkim odcinkiem czasu definiującym skalę czasu obserwacji procesu dyfuzji, to wtedy dla

$$\tau \ll \tau_*, \quad (3.44)$$

wzór Stokesa (3.24) może być zaakceptowany i proces dyfuzji może być traktowany jako proces quasistatyczny, czyli jako ciąg stanów równowagowych [72]. Z równań (3.41) i (3.42) wynika, że τ ma podobne znaczenie, ponieważ granica $\tau \rightarrow 0$ z $\zeta = \text{const.}$ daje

$$\mathbf{b} = \mathbf{v} - \mathbf{u} \frac{\mathbf{F}}{\zeta}, \quad (3.45)$$

co wraz z równaniami (3.29) i (3.33) daje klasyczny opis procesu dyfuzji. Jeśli

$$\tau \geq \tau_*, \quad (3.46)$$

to zastosowanie relacji Stokesa nie jest uzasadnione [72]. W tym przypadku proponujemy opis procesu dyfuzji oparty na relacji Nelsona (3.38) ÷ (3.40) gdy dyfuzję opisują równania (3.35) ÷ (3.37) oraz (3.41) lub równoważnie (3.33) i (3.41), gdzie zakładamy, że zachodzi związek (3.20) (porównaj równania (3.35) i (3.36))

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = -D \frac{\nabla \rho(\mathbf{x}, t)}{\rho(\mathbf{x}, t)} = -\nabla \ln \left(\frac{\rho(\mathbf{x}, t)}{\rho_0} \right), \quad \rho_0 = p_0 M_0. \quad (3.47)$$

Ten układ równań jest równoważny równaniom (3.11), (3.20), (3.28), (3.36) i (3.41) i całkowicie charakteryzuje proces Markova [53]. Tak zdefiniowany proces Markova jest nazywany *ruchem Nelsona-Browna dyfundującego atomu* [97].

Zauważmy, że równanie ciągłości (3.37) jest liniowe względem zmiennych p i $\mathbf{j} = p \mathbf{v}$. Oznacza to, że jeśli pary $p_i, \mathbf{j}_i, i = 1, 2$, są rozwiązaniami, to również para p, \mathbf{j} , zgodnie z definicją

$$p = p_1 + p_2, \quad \mathbf{j} = p \mathbf{v} = p_1 \mathbf{v}_1 + p_2 \mathbf{v}_2, \quad (3.48)$$

też jest rozwiązaniem. Mówimy tu o tym, gdyż relacja Nelsona (3.41) nie ma tej właściwości [53].

Relacja Nelsona jest odpowiedzialna za to, że opis ruchu Nelsona-Browna zależy od ewolucji wartości średnich tego ruchu. Oznacza to z punktu widzenia procesu dyfuzji, że relacja Nelsona nakłada pewne więzy na mikrostany dyfundującej materii sprzeciwiające się całkowicie chaotycznym ruchom z powodu braku oddziaływań między dyfundującymi atomami. Jako fizyczne uzasadnienie tak nałożonych więzów, można na przykład

zapropozować oddziaływania deformacyjne, obserwowane między innymi w dyfuzji wodoru w metalach [96]. Tutaj, obce atomy wodoru zajmują w metalach położenia międzywęzłowe i proces dyfuzji może być opisany jako tzw. chemiczna dyfuzja z małymi koncentracjami [136]. Atomy międzywęzłowe deformują sieć rozpychając otaczające atomy matrycy. Te z kolei przemieszczają kolejne sąsiednie atomy, pojawia się pole przemieszczeń zanikające jak r^{-2} . Tak więc, nawet przy małych koncentracjach, dyfundujące atomy oddziałują ze sobą poprzez wytworzone pole przemieszczeń i może się generować pewne uporządkowanie rozkładu dyfundujących atomów. Istnienie takiej podstruktury zależy bardzo silnie od temperatury. Powróćmy do tego zagadnienia w dalszej części tego rozdziału.

3.4. Analogia z mechaniką kwantową i strukturami dyssypatywnymi

Postępując zgodnie z ogólnie przyjętymi zasadami metody kwantowania stochastycznego opisanymi w pracach Nelsona [106], [107] oraz w pracach [53] i [155], rozpatrzmy teraz ruch Nelsona-Browna w przypadku, gdy prędkość specjalna (peculiar velocity) $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ i siła zewnętrzna $\mathbf{F}(\mathbf{x}, t)$ są polami potencjalnymi, tzn. gdy

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = 2D \nabla S(\mathbf{x}, t), \quad (3.49)$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}, t) = -\nabla U(\mathbf{x}, t). \quad (3.50)$$

Wiemy, że pole $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ ma podobną reprezentację (porównaj równanie (3.36))

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = 2D \nabla R(\mathbf{x}, t), \quad (3.51)$$

gdzie

$$R(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{p(\mathbf{x}, t)}{p_0} \right). \quad (3.52)$$

Tak więc, równania (3.37) i (3.38) przyjmują następującą postać:

$$\partial_t R = -D\Delta S - 2D \nabla R \cdot \nabla S, \quad (3.53)$$

$$\partial_t S = D\Delta S - D((\nabla S)^2 - (\nabla R)^2) - \frac{V}{2Dm}, \quad (3.54)$$

gdzie

$$V = U + \frac{2Dm}{\tau}(R + S + C(t)), \quad (3.55)$$

a $C_t(t) = -C(t)/2Dm$ – stała całkowania równania (3.49), może być zawsze położona jako równa zero, przez odpowiedni dobór $S(t)$.

Wprowadźmy nową zmienną

$$\psi(\mathbf{x}, t) = e^{R+iS}. \quad (3.56)$$

Równania (3.53) i (3.54) dadzą się teraz zapisać w następującej postaci:

$$i\hbar \partial_t \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V \psi, \quad (3.57)$$

gdzie

$$V = U + \frac{\hbar}{2\tau} (\ln |\psi|^2 + i \ln(\frac{\psi^*}{\psi}) + C(t)), \quad (3.58)$$

a \hbar jest zdefiniowane przez równanie

$$\hbar = 2Dm. \quad (3.59)$$

W tych nowych zmiennych równania (3.49) i (3.51) przyjmują następujące formy:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = -\frac{\hbar}{2m} \nabla \ln |\psi|^2, \quad (3.60)$$

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = -\frac{i\hbar}{2m} \nabla \ln \frac{\psi^*}{\psi}. \quad (3.61)$$

Tak więc, równanie (3.57) jest teraz nową fenomenologiczną reprezentacją układu równań (3.36), (3.37) i (3.41), a równania (3.60) i (3.61) definiują pola $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ i $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ ruchu Nelsona-Browna opisującego proces dyfuzji.

Dla $\tau \rightarrow \infty$ równanie (3.57) przyjmuje postać podobną do równania Schrödingera

$$i\hbar \partial_t \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U \psi. \quad (3.62)$$

Nie jest to jednakże równanie Schrödingera, ponieważ w granicy ważności empirycznego wzoru Arrheniusa na współczynnik dyfuzji (3.1) parametr \hbar nie osiąga wartości stałej Plancka. Można łatwo pokazać, że dla parametru

\hbar równemu liczbowo stałej Plancka i dla danych doświadczalnych wartości parametrów D_0 i E_a dla różnych metali wyliczona temperatura znacznie przekracza temperaturę topnienia [31], [93].

W związku z powyższą konkluzją ograniczymy się w dalszych rozważaniach do przedziału $0 \leq \tau < \infty$, ponieważ przypadek $\tau = \infty$ nie jest typowy dla zjawiska dyfuzji.

Zauważmy, że chociaż równanie (3.57) nie jest równaniem mechaniki kwantowej, to jednak opisuje pewne kwantowe zjawiska, gdyż prawdopodobieństwo przejścia z jednego położenia międzywęzłowego do następnego zależy od masy dyfundującego atomu. Jest to możliwe jako wynik pewnych efektów kwantowych i może być uwzględnione w obliczeniach współczynnika dyfuzji D [52]. Efekty kwantowe są szczególnie ważne w niskich temperaturach, gdzie już nie stosuje się wzoru Arrheniusa i gdzie zagadnienie parametru \hbar pojawia się ponownie. Pozostawiamy tu ten problem otwarty, gdyż leży on poza tematem naszych rozważań: chcemy opisywać zjawiska makroskopowe, a nie kwantowe.

Jak dotychczas, równania (3.57) i (3.58) nie zawierały wielkości mikroskopowych. Wielkość \hbar jest interpretowana jako pewna stała materiałowa o wymiarze działania ($[\hbar] = \text{g cm}^2 \text{sec}^{-1}$). Stała \hbar wraz ze współczynnikiem dyfuzji D ($[D] = \text{cm}^2 \text{sec}^{-1}$) i czasem relaksacji τ ($[\tau] = \text{sec}$) charakteryzują właściwości ciała z dyfuzją. Interpretacja równania (3.35) pozostaje niezmienniona: opisuje ono ograniczenie równania (3.63)

$$i\hbar \partial_t \psi = -D \Delta \psi + \frac{1}{\hbar} V \psi, \quad (3.63)$$

do przypadków, gdy oddziaływania między dyfundującymi atomami mogą być zaniedbane. Tak więc funkcja (3.10) jest prawdopodobieństwem, że dyfundujący atom w chwili t znajduje się wewnątrz zbioru \mathcal{P} . Jeśli równaniu (3.63) nadamy taką interpretację, to losowy ruch dyfundującej atomu o masie m może być rozważany jako ruch Nelsona-Browna, jeśli tylko spełniony jest warunek

$$m = \frac{\hbar}{2D}. \quad (3.64)$$

Nieliniowość³ rozważanego procesu dyfuzji względem ρ i losowy charakter jego mikroskopowego mechanizmu sugeruje, że równanie (3.63) może być

³ K.H. Anthony w nieopublikowanej pracy z 1983 r. pokazał, że równanie

użyte do opisu stanów dyfuzyjnych dalekich od stanu równowagi termodynamicznej [62]. Z tego punktu widzenia, rozwiązania stacjonarne równania (3.63), czyli rozwiązania o postaci

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \phi(\mathbf{x}) e^{(-iFt/\hbar)}, \quad (3.65)$$

są szczególnie interesujące. Tutaj F – stała o wymiarze energii. Stacjonarne rozkłady masy w stanach dalekich od stanów równowagowych są charakterystyczne dla tzw. struktur dyssypatywnych [28], [43]. Takie stacjonarne rozwiązania dla $p(\mathbf{x}, t)$ w postaci (3.35) są możliwe, jeśli $M(t) = M_0 = \text{const.}$ i jeśli

$$\begin{aligned} p(\mathbf{x}) &= \phi^2(\mathbf{x}) p_0, \\ \phi^2(\mathbf{x}) &= \frac{\rho(\mathbf{x})}{\rho_0}, \quad \rho_0 = p_0 M_0. \end{aligned} \quad (3.66)$$

Po podstawieniu równania (3.65) do (3.63) i przyjęciu, że

$$C(t) = \frac{2t}{\hbar} F, \quad U(\mathbf{x}, t) = U_0(\mathbf{x}), \quad (3.67)$$

otrzymujemy

$$D \Delta \phi = \frac{\phi}{\tau} \ln \phi + \frac{1}{\hbar} (U_0(\mathbf{x}) - F) \phi. \quad (3.68)$$

Zauważmy, że w przypadku stacjonarnym, szczególna prędkość znika ($\mathbf{v} = \mathbf{0}$, porównaj równanie (3.61)), co wraz z równaniem (3.20) daje $\mathbf{b} = -\mathbf{u}$. Jeśli położymy $\beta(t) = 0$, to z powyższej dyskusji i z równania (3.47) wynika, że równanie dyfuzji (3.33) jest spełnione tożsamościowo dla dowolnego rozkładu gęstości $\rho(\mathbf{x})$. Oznacza to, że równanie (3.68) opisuje te właściwości stacjonarnego rozkładu dyfundującej materii, które wynikają tylko z relacji Nelsona (3.38)÷(3.40).

Rozważmy przypadek braku zewnętrznych sił, czyli gdy

$$U_0 - F = E_0 = \text{const.} \quad (3.69)$$

Jeśli wprowadzimy oznaczenie

$$\hat{\phi}(\mathbf{r}) = \phi(L\mathbf{r}) e^{E_0\tau/\hbar}, \quad (3.70)$$

Schrödingera i równanie dyfuzji nie mogą być sobie równoważne. Wniosek ten jest prawdziwy tylko dla liniowego równania dyfuzji.

gdzie $\mathbf{r} = \mathbf{x}/L$, $L = \sqrt{D\tau}$, równanie (3.68) może być przepisane w postaci niezależnej jawnie od jakichkolwiek parametrów

$$\Delta_r \hat{\phi}(\mathbf{r}) = \hat{\phi}(\mathbf{r}) \ln \hat{\phi}(\mathbf{r}). \quad (3.71)$$

Powyzsze równanie definiuje stacjonarny rozkład dyfundującej masy

$$\rho(\mathbf{x}) = \rho_r \hat{\phi}^2(\mathbf{x}/L), \quad (3.72)$$

gdzie

$$\rho_r = \rho_0 e^{-2E_0\tau/\hbar}, \quad (3.73)$$

z odpowiadającym mu rozkładem prawdopodobieństwa

$$p(\mathbf{x}) = p_r \hat{\phi}^2(\mathbf{x}/L), \quad (3.74)$$

gdzie

$$p_r = \frac{\rho_r}{M}. \quad (3.75)$$

Zauważmy, że chociaż funkcja $\hat{\phi}(\mathbf{x}) \equiv 1$ dla $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3$ jest rozwiązaniem równania (3.71), to nie spełnia ona warunku na normalizację miary prawdopodobieństwa na \mathbb{R}^3 . Z tego powodu zakładamy, że rozwiązaniu $\hat{\phi}(\mathbf{x}) \equiv 1$ odpowiada następujący rozkład masy:

$$\rho(\mathbf{x}) = \begin{cases} \rho_r & \text{dla } \mathbf{x} \in \Omega(\rho), \\ 0 & \text{dla } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3/\Omega(\rho), \end{cases} \quad (3.76)$$

gdzie $\Omega(\rho) \subset \mathbb{R}^3$ – obszar o skończonej objętości. Ponieważ jednorodny rozkład masy M skoncentrowanej w $\Omega(\rho)$ jest dany jako

$$\rho_r = \frac{M_0}{V}, \quad (3.77)$$

gdzie $V = \text{vol } \Omega(\rho)$, to mamy

$$E_0 = \frac{\hbar}{2\tau} \ln(p_0 V), \quad (3.78)$$

gdzie $p_0 = \rho_0/M_0$. Rozkładowi masy (3.77) odpowiada rozkład prawdopodobieństwa

$$p_r(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1/V & \text{dla } \mathbf{x} \in \Omega(\rho), \\ 0 & \text{dla } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3/\Omega(\rho). \end{cases} \quad (3.79)$$

Wprowadzimy teraz entropię statystyczną $S(p)$ jako miarę nieokreśloności statystycznego opisu stanów stacjonarnych procesów dyssypatywnych. Definiowana jest ona następująco:

$$S(p) = \int_{\mathbb{R}^3} dS(p(\mathbf{x})), \quad (3.80)$$

gdzie

$$dS(p(\mathbf{x})) = p_0 \eta \left(\frac{p(\mathbf{x})}{p_0} \right) dV_0, \quad (3.81)$$

a

$$\eta(w) = \begin{cases} -kw \ln w & \text{dla } w > 0, \\ 0 & \text{dla } w = 0. \end{cases} \quad (3.82)$$

Niech $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, $0 < V = \text{vol } \Omega < \infty$ będzie pewnym obszarem i niech $p(\mathbf{x})$ będzie rozkładem prawdopodobieństwa na \mathbb{R}^3 , dla którego

$$\Omega(\rho) = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 : p(\mathbf{x}) > 0\} = \Omega, \quad (3.83)$$

gdzie $p(\mathbf{x}) = \rho(\mathbf{x})/M_0$. Mamy więc, że

$$\int_{\Omega} p(\mathbf{x}) dV(\mathbf{x}) = 1. \quad (3.84)$$

W takiej sytuacji [72]

$$S(p(\mathbf{x})) \leq S(p_r) = k \ln(p_0 V), \quad (3.85)$$

gdzie p_r jest prawdopodobieństwem danym przez równanie (3.79). Nierówność w (3.85) jest osiągalna dla wystarczająco gładkich rozkładów $p(\mathbf{x})$ tylko wtedy, gdy $p(\mathbf{x}) = p_r$. Można pokazać, że dla rozkładów prawdopodobieństwa $p(\mathbf{x})$ na \mathbb{R}^3 zdefiniowanych przez równanie (3.66) z $\rho(\mathbf{x})$ o postaci

$$\rho(\mathbf{x}) = \begin{cases} \frac{M_0}{V_0} \hat{\phi}^2 \left(\frac{\mathbf{x}}{L} \right) & \text{dla } \mathbf{x} \in \Omega \\ 0 & \text{dla } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 \setminus \Omega \end{cases} \quad (3.86)$$

gdzie $\hat{\phi}(\mathbf{r})$ jest rozwiązaniem równania (3.71) w Ω , a E_0 ma postać (3.78). Jeśli spełnione są warunki (3.83) i (3.84), to wtedy nasze wymaganie, aby $\nabla \rho(\mathbf{x}) \neq \mathbf{0}$ dla niemal wszystkich $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$, implikuje nierówność

$$S(p(\mathbf{x})) < S(p_r). \quad (3.87)$$

Nierówność (3.87) jest sformułowana dla jednoatomowego mikrostanu. Nasze założenie o braku oddziaływań pomiędzy dyfundującymi atomami ma swój matematyczny obraz w addytywności funkcjonału $S(p)$: pozwala to na połączenie wielu niezależnych systemów w jeden i do przejścia nierówności (3.87) na cały mikrostan [43].

Malenie (wzrost) miary nieokreśloności opisu statystycznego jest zazwyczaj interpretowane jako wzrost (malenie) poziomu uporządkowania mikrostanów odpowiadających rozważanej mierze, np. poziom dla $S(p_r) = k \ln(p_0 V)$ w (3.87). Rozkład p_r w postaci (3.79) może być rozważany jako opisujący chaotyczny i równowagowy w przestrzeni rozkład dyfundujących atomów w Ω (typu cząsteczek Browna [122]). Nieznikający gradient gęstości, powodujący zajście nierówności (3.87), powoduje pojawienie się przestrzennego uporządkowania na mikropoziomie. Jest to charakterystyczny obraz dla pewnych struktur dyssypatywnych, zwanych *dyssypatywnymi strukturami Turinga*. Istnienie takich struktur jest potwierdzone doświadczalnie. Mogą się one pojawić jako wynik perturbacji niszczących stabilność jednorodności równowagowych rozkładów materii i mają niższą symetrię niż rozkłady wyjściowe [28].

Pełny opis zjawisk oddziaływań deformacyjnych w kontekście relacji Nelsona wymaga rozszerzenia naszego podejścia do opisu polowego całego ciała z dyfuzją. A to już wymaga innego aparatu pojęciowego.

Należy podkreślić, że w celu interpretacji równania (3.71) jako równania opisującego struktury dyssypatywne, powinno się wprowadzić obszar ograniczony. W przeciwnym przypadku może się zdarzyć⁴, że system nie mógłby być traktowany jako termodynamicznie otwarty (patrz np. [43]).

3.5. Wpływ czasu relaksacji na proces dyfuzji

Rozważmy stan stacjonarny dyfundującej materii z przypisaną mu energią charakterystyczną $\theta > 0$. Na przykład, $\theta = kT$, gdy mamy do czynienia ze stanem równowagi. Wprowadźmy dwa bezwymiarowe parametry $\alpha = \alpha(\hbar, \tau, \theta) > 0$ i $\beta = \beta(m, \hbar, D) > 0$, w postaci

$$\alpha = \frac{\theta \hbar}{\tau}, \quad \beta = \frac{\hbar}{m D}. \quad (3.88)$$

⁴ Ograniczoność układu termodynamicznego nie jest warunkiem koniecznym jego otwartości termodynamicznej [146].

Tutaj τ – stała o wymiarze czasu zdefiniowana równaniem (3.42). Z równań (3.42) i (3.88) wynika, że

$$D = \frac{\theta}{\alpha \beta \zeta}. \quad (3.89)$$

Jeśli potraktujemy proces dyfuzji jako ruch Nelsona-Browna, to $\beta = 2$ i

$$D = \frac{\theta}{2\alpha \zeta}. \quad (3.90)$$

W sytuacji, gdy współczynnik dyfuzji D zależy od czasu relaksacji, czyli gdy $\alpha = \alpha(\tau)$ i

$$D = D(\Lambda_\tau) = \frac{k \Lambda_\tau}{\zeta}, \quad (3.91)$$

gdzie

$$\Lambda_\tau = \frac{\theta(\tau)}{2k \alpha(\tau)}, \quad (3.92)$$

zakładamy, że

$$\lim_{\substack{\tau \rightarrow 0 \\ \zeta = \text{const.}}} \alpha(\tau) = \alpha(0) = \frac{1}{2}. \quad (3.93)$$

ponieważ wtedy

$$\lim_{\substack{\tau \rightarrow 0 \\ \zeta = \text{const.}}} D(\Lambda_\tau) = D(\Lambda_0) = \frac{k \Lambda_0}{\zeta}, \quad (3.94)$$

gdzie

$$\Lambda_0 = \frac{\theta_0}{k}, \quad \theta_0 = \lim_{\tau \rightarrow 0} \theta(\tau), \quad (3.95)$$

i

$$D(\Lambda_0) = \frac{\theta_0}{\zeta}. \quad (3.96)$$

Dla stanów równowagowych, czyli wtedy, gdy $\theta_0 = kT$, równanie (3.96) odtwarza relację Einsteina (3.29), a gdy

$$\theta_0 = \zeta D_0 e^{-E_0/kT}, \quad (3.97)$$

to $D(\Lambda_0)$ jest zgodne ze wzorem Arrheniusa (3.1). Można pokazać, że jeśli położymy $D = D(\Lambda_\tau)$ dla $0 < \tau < \infty$, to rozważania z podrozdziałów 3.4

i 3.5 pozostają bez zmian. W granicy, gdy $\tau \rightarrow 0$ i $\zeta = \text{const.}$, klasyczne równanie dyfuzji ma postać (3.33) z $D = D(\Lambda_0)$ i \mathbf{b} zdefiniowanym przez (3.24). Przypadek graniczny $\tau \rightarrow \infty$ wymaga zrobienia dodatkowego założenia o istnieniu granicy $D(\Lambda_\tau)$

$$D_\infty = \lim_{\substack{\tau \rightarrow \infty \\ \zeta = \text{const.}}} D(\Lambda_\tau) > 0. \quad (3.98)$$

W tym przypadku dostaniemy równanie typu (3.62) ale z $\hbar = \hbar_\infty = 2m D_\infty$. Po wykorzystaniu równań (3.42), (3.64) i (3.91) możemy przepisać równanie (3.68) w następującej postaci:

$$\tau D(\Lambda_\tau) \Delta \bar{\phi} = \bar{\phi} \ln \bar{\phi} + \frac{1}{2k \Lambda_\tau} (U_0 - F) \phi, \quad \tau > 0, \quad (3.99)$$

gdzie

$$\bar{\phi}(\mathbf{r}) = \phi(L\mathbf{r}). \quad (3.100)$$

Z równania (3.94) wynika, że

$$\lim_{\substack{\tau \rightarrow \infty \\ \zeta = \text{const.}}} \tau D(\Lambda_\tau) = 0, \quad (3.101)$$

a odpowiednie rozwiązanie równania (3.99) ma postać

$$\phi_0(\mathbf{x}) = \exp\left(-\frac{U_0(\mathbf{x}) - F}{2k \Lambda_0}\right). \quad (3.102)$$

Rozwiązanie to definiuje rozkład prawdopodobieństwa $q_0(\mathbf{x})$ w postaci

$$\begin{aligned} q_0(\mathbf{x}) &= p_0 \phi_0^2(\mathbf{x}) = C \exp\left(-\frac{U_0(\mathbf{x})}{k \Lambda_0}\right), \\ C &= p_0 \exp\left(\frac{F}{k \Lambda_0}\right), \end{aligned} \quad (3.103)$$

(porównaj równanie (3.66)). Z warunku normalizacji miary prawdopodobieństwa wynika, że powinien zachodzić związek

$$\begin{aligned} F &= k \Lambda_0 \ln Z, \\ Z &= p_0 \int_{\mathbb{R}^3} \exp\left(-\frac{U_0(\mathbf{x})}{k \Lambda_0}\right) dV(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (3.104)$$

lub równoważnie

$$F = E - \Lambda_0 S(q_0), \quad (3.105)$$

gdzie E – jest średnia energia

$$E = \int_{\mathbb{R}^3} U_0(\mathbf{x}) q_0(\mathbf{x}) dV(\mathbf{x}), \quad (3.106)$$

a $S(q_0)$ – entropia statystyczna (3.80).

Jeśli θ jest dane przez równanie (3.97), wtedy $q_0(\mathbf{x})$ ma taką samą postać jak rozkład prawdopodobieństwa $p_0(\mathbf{x})$ zdefiniowany przez równania (3.26), (3.28) i (3.1).

Widać, że w granicy $\tau \rightarrow 0$ i $\zeta = \text{const.}$ równanie (3.99) reprodukuje rozkład prawdopodobieństwa, jaki dyskutowaliśmy w podrozdziale 3.3.

Wspomnieliśmy w podrozdziale 3.5 o możliwości opisu struktur Turinga za pomocą równania (3.71). Charakterystyczne wymiary tych struktur są definiowane przez takie makroskopowe parametry, jak na przykład współczynnik dyfuzji i czasy kinetyczne [28]. W naszym przypadku długość charakterystyczna l wynosi

$$l \sim \sqrt{D\tau}. \quad (3.107)$$

Rozważmy przypadek, gdy stacjonarny rozkład dyfundującej materii ma taki charakterystyczny rozmiar l , że dla pewnego bezwymiarowego parametru $A = A(l, \tau, D) > 0$

$$D = \frac{Al^2}{\tau}. \quad (3.108)$$

Mamy z definicji, iż

$$w = \frac{l}{\tau}, \quad (3.109)$$

$$K = \frac{mw^2}{2}. \quad (3.110)$$

Z równań (3.42), (3.64), (3.88), (3.109) i (3.110) wynika, że

$$K = \frac{\theta}{4A\alpha}. \quad (3.111)$$

Aby znaleźć wartość parametru A gdy $\tau \rightarrow 0$, rozważmy przypadek (3.44), gdy zachodzi relacja Stokesa (3.24), a model dynamiki mikrostanów procesu dyfuzji może być oparty na równaniu Langevina [72], [107]

$$\tau \ddot{\mathbf{z}} = -\dot{\mathbf{z}} + \mathbf{b}(\mathbf{z}, \mathbf{t}) + d\mathbf{W}(t), \quad (3.112)$$

gdzie τ jest zdefiniowany przez równanie (3.42), a $\mathbf{W}(t)$ jest procesem Wienera. Można pokazać, że dla odpowiednio gładkiej funkcji $\mathbf{b}(\mathbf{z}, t)$ rozwiązanie $\mathbf{z} = \mathbf{z}(\tau, t)$, $T \geq 0$, powyższego równania z warunkami początkowymi

$$\mathbf{z}(\tau, 0) = \mathbf{x}_0, \quad \dot{\mathbf{z}}(\tau, 0) = \mathbf{w}_0, \quad (3.113)$$

posiada granicę z prawdopodobieństwem 1

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} \mathbf{z}(\tau, t) = \mathbf{x}(t), \quad (3.114)$$

jednorodną na każdym przedziale $[a, b] \subset [0, \infty)$ i dla każdego $\mathbf{w}_0 \in \mathbb{R}^3$. Tutaj $\mathbf{x}(t)$ jest rozwiązaniem stochastycznego równania Ito (3.7) z warunkiem początkowym $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0$. Wynik pozostanie bez zmian, jeśli prędkość początkowa \mathbf{x}_0 jest losową zmienną Gaussa ze średnią wartością równą zeru i z wariancją wynoszącą $\sigma^2/2\tau$. Oddziaływanie dyfundujących atomów z ciałem jest opisane w równaniu (3.112) przez parametr tarcia ζ i przez parametr wariancji σ^2 . Parametr σ^2 może być wyliczony z warunku, że dla

$$\mathbf{F} = \zeta \mathbf{b} = \mathbf{0}, \quad (3.115)$$

i dla $t \rightarrow \infty$ średnia energia kinetyczna naszego systemu jest równa charakterystycznej energii kinetycznej K stacjonarnego procesu dyfuzji z warunkiem (3.44). Prędkość $\mathbf{w}(t) = \mathbf{z}(\tau, t)$ zdefiniowana przez równania (3.112), (3.113) i (3.115) jest prędkością losową i

$$\begin{aligned} E[\mathbf{w}(t)] &= \mathbf{w}_0 \exp(-t/\tau), \\ E[\mathbf{w}'(t) \otimes \mathbf{w}'(t)] &= \sigma^2 [(1 - \exp(-t/\tau))] I / 2\tau, \end{aligned} \quad (3.116)$$

gdzie $\mathbf{w}'(t) = \mathbf{w}(t) - E[\mathbf{w}(t)]$ [107]. Zauważmy, że

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} E[\mathbf{w}(t)] &= \mathbf{0}, \\ \lim_{t \rightarrow \infty} E\left[\frac{m}{2} \|\mathbf{w}(t)\|^2\right] &= \frac{3}{4} \zeta \sigma^2 = K, \end{aligned} \quad (3.117)$$

dla $\tau \ll \tau_*$. W tym przypadku (porównaj równania (3.28), (3.93), (3.94), (3.111) i (3.117))

$$\frac{1}{2} \sigma^2 = D(\Lambda_\tau) \approx D(\Lambda_0) \quad \text{dla } \tau \ll \tau_*, \quad (3.118)$$

i

$$K \approx \frac{\theta}{2A} \quad \text{dla } \tau \ll \tau_*, \quad (3.119)$$

co daje

$$\lim_{\substack{\tau \rightarrow 0 \\ \zeta = \text{const.}}} A[l, \tau, D(\Lambda_\tau)] = \frac{1}{3}. \quad (3.120)$$

Z równań (3.101), (3.108) i (3.120) wynika, że długość charakterystyczna zależy od czasu relaksacji τ i że

$$\begin{aligned} \lim_{\substack{\tau \rightarrow 0 \\ \zeta = \text{const.}}} l(\tau) &= l(0) = 0, \\ \lim_{\substack{\tau \rightarrow 0 \\ \zeta = \text{const.}}} \frac{l^2(\tau)}{\tau} &= 3D(\Lambda_0) = \frac{3\theta}{\zeta}. \end{aligned} \quad (3.121)$$

Widać stąd, że $l(\tau) = O(\sqrt{\tau})$ (porównaj równanie (3.107)).

Tak więc, warunki (3.90) ÷ (3.94) definiują taką postać zależności współczynnika dyfuzji od czasu relaksacji τ , która jest rozszerzeniem wzorów rozważanych w klasycznym opisie procesu dyfuzji przebiegającego przez stany bliskie stanom równowagi termodynamicznej. W konsekwencji, jeśli czas relaksacji τ nie jest zaniedbywalny (porównaj nierówność (3.46)), to wpływa on nie tylko na charakter dynamiki mikrostanów (relacja Nelsona zamiast relacji Stokesa), ale również na makroskopowe właściwości ciała z dyfuzją ($D = D(\Lambda_\tau)$). Taki proces dyfuzji umożliwia pojawienie się stacjonarnych struktur nierównowagowych dyfundującej materii z pewnym charakterystycznym rozmiarem l zależnym od czasu relaksacji τ zgodnie ze wzorem (3.121). Pokazaliśmy więc, że zjawisko dyfuzji opisane powyżej, może być scharakteryzowane przez zbiór wielkości wymiarowych

$$m, l(\tau), \tau, \hbar(\tau), \quad (3.122)$$

gdzie $\hbar(\tau) = 2m D(\Lambda_\tau)$.

3.6. Wpływ rozkładu defektów punktowych na wartość współczynnika dyfuzji

Użyta tu semiheurystyczna metoda nie ma oczywiście, z fenomenologicznego punktu widzenia, wystarczającej mocy dowodowej. Posłużyła ona

raczej do wskazania miejsca, w którym należy odejść od klasycznego opisu procesu dyfuzji, aby móc reprezentować ją jako ruch Nelsona-Browna i ukazać możliwe konsekwencje wynikające z niej dla teorii fenomenologicznej. Kluczową rolę gra tu takie sformułowanie relacji Nelsona, które może być potraktowane jako uogólnienie relacji Stokesa. Fakt, że relacja Nelsona jest oparta na pojęciu specjalnego (peculiar) przyspieszenia dyfundującej atomu, pozwala na wprowadzenie do fenomenologicznej teorii parametru ze świata mikro: masa m dyfundującego atomu. W konsekwencji, zmieniająca opisujący proces może zostać zmieniona: zamiast gęstości masy $\rho(\mathbf{x})$ wprowadzamy gęstość prawdopodobieństwa lokalizacji dyfundującego atomu $p(\mathbf{x})$. Ograniczenie do przypadku, gdy

$$p(\mathbf{x}, t) = \frac{\rho(\mathbf{x}, t)}{M(t)},$$

pozwała na przejście wielu związków i interpretacji do obszaru spoza granic klasycznego opisu dyfuzji i na zaproponowaniu środków do sformułowania reguł interpretacyjnych równania (3.63) (porównaj równanie (3.87)). Zauważmy, że w rzeczywistości gęstość prawdopodobieństwa $P(\mathbf{x}, t)$ była rozpatrywana jako rodzaj ukrytej, lub jak to się mówi w teorii kontinuum, zmiennej wewnętrznej, czyli zmiennej opisującej wewnętrzny stan materiału (porównaj np. [134]). Z tego punktu widzenia równanie (3.63) wprowadza nową zespoloną zmienną wewnętrzną $\psi(\mathbf{x}, t)$, taką że

$$\frac{p(\mathbf{x}, t)}{p_0} = \psi(\mathbf{x}, t) \psi^*(\mathbf{x}, t).$$

Przeprowadzona dyskusja wskazała, że ta zmienna wewnętrzna może być połączona z istnieniem stanów stacjonarnych dyfundującej materii w stanach dalekich od stanów równowagi termodynamicznej. Przypadek równania (3.71) rozpatrywanego w obszarze ograniczonym sugeruje, że ruch Nelsona-Browna może być powiązany z teorią struktur dyssypatywnych. Takie podejście wymaga jednakże uogólnienia teorii ruchu Nelsona-Browna, gdyż pojawia się wiele nowych zagadnień, takich jak na przykład czas pozostawania atomu Markova w tym obszarze i jego zachowanie na granicy obszaru. Z punktu widzenia teorii struktur dyssypatywnych szczególnie ważne jest rozszerzenie teorii na przypadek dwu (lub więcej) oddziałujących ze sobą chemicznie i dyfundujących atomów (porównaj na przykład

[28]). Byłoby to możliwe, gdyby udało się powiązać przedstawioną tu interpretację metody kwantowania stochastycznego z włączeniem do opisu mieszanych stanów kwantowych, tak jak to zaproponowano w pracy [53].

Rozdział 4

Kryterium ewolucji w ciałach o właściwościach elektromagnetycznych

Pierwsze loty balonem wypełniane ogrzany powietrzem i zbudowanie silnika cieplnego wyprzedziły teorię: silnik parowy został zbudowany w roku 1765 przez Jamesa Watta (1736-1819), natomiast (jedyna) praca Sadi'ego Carnota (1796-1832) ogłoszona w roku 1824, a dotycząca tzw. cyklu Carnota, stała się znana dopiero w roku 1834, gdy Benoit Clapeyron (1799-1864) opublikował jej analityczne przeformułowanie. Od tamtego czasu, stanowiącego prawdziwy przełom i cezurę w nauce i technice, nastąpił oszołamiający rozwój nauki o ciepłe. Jednak termodynamika klasyczna, badająca w zasadzie stany znajdujące się w stanie równowagi termodynamicznej (a mając na uwadze inne działy fizyki, powinno się raczej mówić o termostatyce), mimo wielu spektakularnych sukcesów, nie daje zadowalającego opisu rzeczywistości. Tak więc termodynamika czeka obecnie na zupełnie nowe i całościowe sformułowanie, przełamujące tradycyjne podejście do tego tak fascynującego, ważnego i ciekawego działu nauki.

Większość rzeczywistych procesów termodynamicznych przebiega w stanach oddalonych od równowagi termodynamicznej. Jest więc rzeczą naturalną, że bardzo dużo prac to próby opisu stanów nierównowagowych. Jedną z takich istotnych i ważnych prób były prace Glansdorffa i Prigogine'a dotyczące stabilności układów nierównowagowych i koncentrowały się na poszukiwaniu warunku, jaki musi być spełniony, by układ zmierzał w kierunku równowagi termodynamicznej. Ów warunek nosi nazwę kryterium ewolucji. Kryterium to ma różną postać w zależności od rodzaju i liczby pól uwzględnianych w opisie sytuacji fizycznej.

Przedstawione w tym rozdziale wyniki rozważań dotyczą stanów nierównowagowych układów fizycznych. Są uogólnieniem prac Muschika i Papenfuss [101] i [115] dotyczących kryterium ewolucji dla ciekłych kryształów.

Uogólnienie polega na uwzględnieniu oddziaływania ośrodka mikropolarnego z zewnętrznym polem elektromagnetycznym. Rezultaty tych badań zostały opublikowane w pracach [83] i [121].

4.1. Wprowadzenie w zagadnienie kryterium ewolucji

Kryterium ewolucji nazywamy warunek, jaki musi być spełniony, by układ ewoluował w kierunku równowagi termodynamicznej. Kryterium to zostało sformułowane przy założeniu istnienia stanu lokalnej równowagi termodynamicznej przez Glansdorffa i Prigogine'a w pracach [55] i [56], a następnie podsumowane w pracy [57]. Rozróżnia się dwa typy problemów: — takie, dla których istnieje tzw. *potencjał kinetyczny* i które, w związku z tym, można sformułować w języku rachunku wariacyjnego; — takie, dla których potencjał kinetyczny nie istnieje.

Założmy, że warunki brzegowe są zgodne z możliwością trwania układu w stanie równowagi. W takim przypadku potrzebnego kryterium dostarcza nam druga zasada termodynamiki: produkcja entropii nigdy nie jest ujemna

$$d_i S \geq 0. \quad (4.1)$$

Równość w powyższym wyrażeniu odpowiada stanowi równowagi (lub procesom odwracalnym). Zmiana entropii zachodzi z dwu powodów:

$$dS = d_i S + d_e S, \quad (4.2)$$

w wyniku produkcji entropii $d_i S$ przez procesy zachodzące wewnątrz układu, oraz przez dopływ entropii $d_e S$ w wyniku oddziaływania układu ze światem zewnętrznym. Ponieważ produkcja entropii odpowiada tylko za część wzrostu entropii, więc nie jest to różniczka zupełna. Jednakże w przypadku, gdy ewolucja systemu zachodzi w taki sposób, że istnieje potencjał kinetyczny, to wyrażenie z lewej strony nierówności (4.1) może być przetransformowane w różniczkę zupełną. Pokazuje to poniższy przykład zaczerpnięty z pracy [57].

Przykład 4.1.

Dla systemów znajdujących się w stałej temperaturze i w stałej objętości, produkcja entropii jest różniczką zupełną:

$$d_i S = -\frac{(dF)_{TV}}{T} \geq 0, \quad (4.3)$$

gdzie F – energia swobodna Helmholtza. Ewolucja systemu postępuje w kierunku zmniejszania F , aż do momentu, gdy F osiągnie minimum, czyli gdy układ znajdzie się w równowadze. Wyrażenie (4.3) pełni tu rolę kryterium ewolucji.

Rozważmy teraz sytuację, gdy zadane są warunki brzegowe niezgodne ze stanem równowagi. Układ może zatem przejść do stanu ustalonego (jak to ma miejsce na przykład w przypadku problemu przewodnictwa ciepła z temperaturą określoną na jednej z powierzchni), jeśli będą spełnione pewne dodatkowe warunki. Wprowadźmy nową wielkość nie będącą różniczką zupełną i spełniającą warunek

$$dD \leq 0, \quad (4.4)$$

przy czym $dD < 0$ dla procesów zależnych od czasu i $dD = 0$ dla procesów ustalonych. Znak jest sprawą konwencji. Nierówność (4.4) pozostaje prawdziwa zawsze, ponieważ warunek ten jest spełniony dla wszystkich sytuacji niezależnych od czasu i z uzgodnionymi warunkami brzegowymi, a nie tylko dla stanów równowagowych, jak to miało miejsce w nierówności (4.1). Uogólnienie nierówności (4.4) na przypadek nierównowagowy rodzi następujące pytanie: czy istnieje potencjał analogiczny do F , który poprzez swój znak określa kierunek ewolucji? Inaczej mówiąc, czy istnieje taki dodatni czynnik całkujący ϵ , że

$$\epsilon dD = d\Phi, \quad (4.5)$$

gdzie $d\Phi$ jest różniczką zupełną pewnej funkcji? Okazuje się, że takie funkcje w warunkach nierównowagi istnieją. Noszą one nazwę potencjałów kinetycznych i należy je odróżnić od potencjałów termodynamicznych i potencjałów prędkości. Znaleźć potencjał kinetyczny nie zawsze się jednak udaje. By znaleźć taki potencjał trzeba na ogół zrobić szereg upraszczających założeń, co znacznie umniejsza znaczenie uzyskanego rezultatu.

Wyniki dotyczące możliwości włączenia do formalizmu zjawisk elektromagnetycznych w ośrodku mikropolarnym zostaną przedstawione w dalszych podrozdziałach. Poniższy przykład demonstruje zasady formułowania kryterium ewolucji [57].

Przykład 4.2.

Rozważmy prosty przykład kryterium ewolucji dla procesów dyssypatywnych (bez konwekcji) w wieloskładnikowym ośrodku ciągłym. Równania zachowania masy i energii przyjmują następującą postać:

$$d_t \varrho_\gamma = \sum_j v_{\gamma j} M_\gamma w_j (\varrho_\gamma \Delta_{\gamma j})_{,j} , \quad (4.6)$$

$$d(\varrho e) = \sum_\gamma F_{\gamma j} \varrho_\gamma \Delta_{\gamma j} - W_{j,j} . \quad (4.7)$$

gdzie ϱ_γ – gęstość masy składnika γ ($\varrho = \sum_\gamma \varrho_\gamma$), $\Delta_\gamma = \mathbf{v}_\gamma - \mathbf{v}$ – prąd dyfuzji składnika γ ($\sum_\gamma \varrho_\gamma \Delta_\gamma = \mathbf{0}$), \mathbf{F}_γ – siła grawitacyjna działająca na składnik γ , \mathbf{W} – strumień ciepła, M_γ – masa molowa składnika γ . Po pewnych niewielkich przekształceniach i wycalkowaniu przez części otrzymujemy:

$$\int \left\{ W_j d_t T^{-1}_{,j} - \sum_\gamma \varrho_\gamma \Delta_{\gamma j} d_t [(\mu_\gamma T^{-1})_{,j} - T^{-1} F_{\gamma j}] + \sum_\lambda w_\lambda d_t (A_\lambda T^{-1}) \right\} dV \leq 0 , \quad (4.8)$$

gdzie T – temperatura bezwzględna, μ – potencjał chemiczny, A_γ – afiniczność reakcji chemicznej.

Wyrażenie na produkcję entropii w ujęciu Onsagera ma postać

$$P[S] = \int \sum_\alpha J_\alpha X_\alpha dV \geq 0 . \quad (4.9)$$

Zmianę w czasie wyrażenia (4.9) można rozbić na dwie części

$$\frac{dP}{dt} = \frac{d_X P}{dt} + \frac{d_J P}{dt} , \quad (4.10)$$

gdzie z definicji

$$\frac{d_X P}{dt} = \int \sum_\alpha J_\alpha d_t X_\alpha dV , \quad \frac{d_J P}{dt} = \int \sum_\alpha X_\alpha d_t J_\alpha dV . \quad (4.11)$$

Porównując teraz nierówność (4.8) z (4.9) widać, że

$$\frac{d_X P}{dt} \leq 0. \quad (4.12)$$

Jest to zwarta postać kryterium ewolucji dla układów dyssypatywnych. Kryterium to jest niezależne od jakichkolwiek założeń na temat wzajemnych relacji pomiędzy siłami a prędkościami.

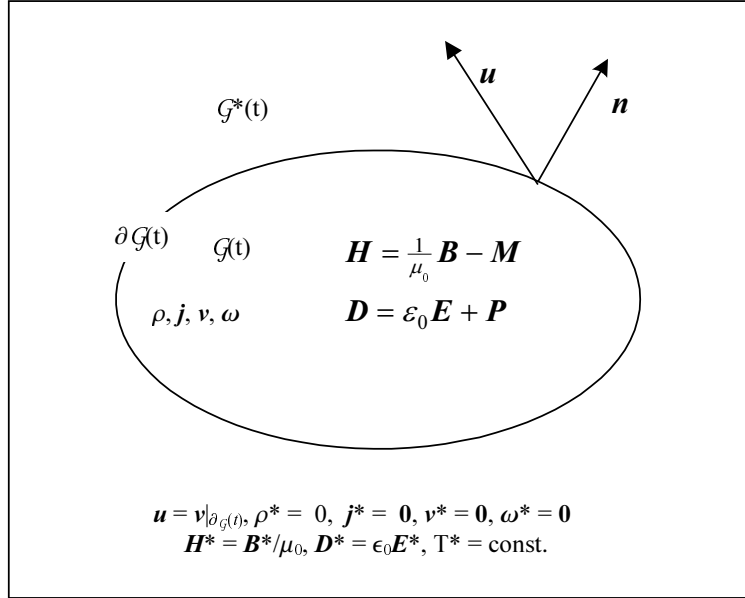
Zagadnienie możliwości sformułowania kryterium ewolucji było studiowane przez wielu autorów. Do najnowszych, wykorzystujących ostatnie osiągnięcia termodynamiki nierównowagowej, należy zaliczyć prace Muschika i Papenfuss [101] i [115], dotyczące kryterium ewolucji dla ciekłych kryształów. Poniżej omawiane wyniki opierają się na wymienionych pracach, będąc równocześnie ich uogólnieniem, poprzez wprowadzenie oddziaływania z zewnętrznym polem elektromagnetycznym [83], [121].

4.2. Uwzględnienie w kryterium ewolucji oddziaływań elektromagnetycznych

Sformułujemy teraz kryterium ewolucji dla procesów termo-elektro-magneto-dynamicznych w ciałach mikropolarnych wykazujących wrażliwość na pola elektromagnetyczne. Rozpatrzmy dwie sytuacje, dla których trzeba będzie określić dwa rodzaje warunków brzegowych:

1. ciało jest zanurzone w próżni i oddziałuje z zewnętrznym polem elektromagnetycznym emitowanym przez ciało doskonale czarne;
2. ciało jest zanurzone w cieczy dielektrycznej i jest wrażliwe na działanie zewnętrznego pola elektromagnetycznego.

Punktem startowym są dwa prawa termodynamiki, które za Eringenem [44], [46], [47], [48] zapisujemy w następujący sposób:



Rys. 4.1. Stosowane oznaczenia

– pierwsze prawo termodynamiki (prawo zachowania energii)

$$\begin{aligned}
 & \frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{G}(t)} \left[\rho \epsilon + \frac{1}{2} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \frac{1}{2} \rho \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\omega} + \frac{1}{2} (\epsilon_0 \mathbf{E} \cdot \mathbf{E} + \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B} \cdot \mathbf{B}) \right] dV \\
 & - \oint_{\partial \mathcal{G}(t)} \mathbf{n} \cdot [(\mathbf{t} + \mathbf{m} \mathbf{t} + \mathbf{v} \otimes \mathbf{G}) \cdot \mathbf{v} + \mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\omega} + \mathbf{q} - \mathbf{S}] dA \\
 & - \int_{\mathcal{G}(t)} \rho (\tilde{\mathbf{f}} \cdot \mathbf{v} + \tilde{\mathbf{l}} \cdot \boldsymbol{\omega} + \tilde{h}) dV = 0,
 \end{aligned} \tag{4.13}$$

– drugie prawo termodynamiki (nierówność entropijna)

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{G}(t)} \rho \eta dV - \oint_{\partial \mathcal{G}(t)} \mathbf{n} \cdot \mathbf{s} dA - \int_{\mathcal{G}(t)} \rho \tilde{b} dV \geq 0. \tag{4.14}$$

Użyliśmy tu następujących oznaczeń ([44], [82], [101]): ρ – gęstość masy, \mathbf{q} – wektor ciepła (skierowany przeciwnie do wektora strumienia ciepła), \mathbf{S} – wektor Poyntinga

$$\mathbf{S} \doteq \boldsymbol{\mathcal{E}} \times \boldsymbol{\mathcal{H}}, \quad \boldsymbol{\mathcal{H}} \doteq \mathbf{H} - \mathbf{v} \times \mathbf{D}, \quad (4.15)$$

\mathbf{G} – elektromagnetyczny wektor pędu

$$\mathbf{G} \doteq \varepsilon_0 \mathbf{E} \times \mathbf{B}, \quad (4.16)$$

${}_{\mathbf{M}}\mathbf{t}$ – tensor naprężenia Maxwella

$${}_{\mathbf{M}}\mathbf{t} \doteq \mathbf{P} \otimes \boldsymbol{\mathcal{E}} - \mathbf{B} \otimes \boldsymbol{\mathcal{M}} + \varepsilon_0 \mathbf{E} \otimes \mathbf{E} + \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B} \otimes \mathbf{B} - ({}_{\mathbf{M}}\epsilon - \boldsymbol{\mathcal{M}} \cdot \mathbf{B}) \mathbf{I}, \quad (4.17)$$

gdzie ${}_{\mathbf{M}}\epsilon$ – energia „swobodnego” pola elektromagnetycznego [47], [48]

$${}_{\mathbf{M}}\epsilon \doteq \frac{1}{2}(\varepsilon_0 \mathbf{E} \cdot \mathbf{E} + \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B} \cdot \mathbf{B}), \quad (4.18)$$

\tilde{h} – wydajność źródła energii, ϵ – gęstość energii wewnętrznej, \mathbf{s} – wpływ entropii poprzez powierzchnię ciała, η – gęstość entropii, \tilde{b} – wydajność źródła entropii, \mathbf{t} – tensor naprężenia, \mathbf{m} – tensor naprężeń momentowych, $\boldsymbol{\sigma}$ – spin, \mathbf{v} – prędkość materialna, $\boldsymbol{\omega}$ – prędkość kątowna direktora, $\tilde{\mathbf{f}}$ – wektor sił objętościowych, $\tilde{\mathbf{l}}$ – moment przyłożonych sił objętościowych, \mathbf{n} – zewnętrzny normalny wektor jednostkowy (Rys. 4.1). Pola $\boldsymbol{\mathcal{E}}$, $\boldsymbol{\mathcal{H}}$, $\boldsymbol{\mathcal{M}}$, \mathbf{S} to natężenie pola elektrycznego, natężenie pola magnetycznego, magnetyzacja i wektor Poyntinga zapisane w ruchomym układzie odniesienia poruszającym się wraz z cząstką.

Porównując (4.2) z drugim prawem termodynamiki (4.14) widać, że

$$dS \doteq \frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{G}(t)} \rho \eta dV, \quad (4.19)$$

$$d_e S \doteq \oint_{\partial \mathcal{G}(t)} \mathbf{n} \cdot \mathbf{s} dA + \int_{\mathcal{G}(t)} \rho \tilde{b} dV. \quad (4.20)$$

Z powyższego wzoru wynika, że entropia $d_e S$ może być dostarczana do układu poprzez brzeg i przez źródła wewnętrzne. Produkcja entropii $d_i S$ nie może być nigdy ujemna: to jest treścią drugiego prawa termodynamiki.

Lokalne postacie pierwszego (4.13) i drugiego (4.14) prawa termodynamiki są następujące:

– lokalna postać prawa zachowania energii

$$\begin{aligned} & \rho \dot{\epsilon} - \mathbf{t} : \mathbf{a} - \mathbf{m}^T : \mathbf{b} - \nabla \cdot \mathbf{q} - \rho \dot{h} \\ & - \boldsymbol{\varepsilon} \cdot [\boldsymbol{\mathcal{J}} + \dot{\mathbf{P}} + \mathbf{P}(\nabla \cdot \mathbf{v})] + \mathcal{M} \cdot \dot{\mathbf{B}} + (\mathbf{P} \times \boldsymbol{\varepsilon} + \mathcal{M} \times \mathbf{B}) \cdot \boldsymbol{\omega} = 0, \end{aligned} \quad (4.21)$$

z warunkiem brzegowym na $\partial\mathcal{G}(t)$:

$$\begin{aligned} & \mathbf{n} \cdot [(\rho \epsilon + \frac{1}{2}\rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \frac{1}{2}\rho \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\omega} + \frac{1}{2}\varepsilon_0 \mathbf{E} \cdot \mathbf{E} + \frac{1}{2\mu_0} \mathbf{B} \cdot \mathbf{B})(\mathbf{v} - \mathbf{u}) \\ & - (\mathbf{t} + {}_{\mathbf{M}}\mathbf{t} + \mathbf{u} \otimes \mathbf{G}) \cdot \mathbf{v} - \mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\omega} - (\mathbf{q} - \mathcal{S})] = 0, \end{aligned} \quad (4.22)$$

– lokalna postać nierówności entropijnej

$$\rho \dot{\eta} - \nabla \cdot \mathbf{s} - \rho \dot{b} \geq 0, \quad (4.23)$$

z warunkiem brzegowym na $\partial\mathcal{G}(t)$:

$$\mathbf{n} \cdot [\rho \eta(\mathbf{v} - \mathbf{u}) - \mathbf{s}] \geq 0. \quad (4.24)$$

Tutaj \mathbf{u} – prędkość powierzchni brzegowej, \mathbf{a} i \mathbf{b} – tensory prędkości deformacji

$$\mathbf{a} \doteq \nabla \otimes \mathbf{v} - \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\omega}, \quad \mathbf{b} \doteq (\nabla \otimes \boldsymbol{\omega})^T, \quad (4.25)$$

\mathbf{P} i \mathcal{M} – odpowiednio wektory polaryzacji i magnetyzacji,

$$\mathbf{P} \doteq \mathbf{D} - \varepsilon_0 \mathbf{E}, \quad \mathcal{M} \doteq \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B} - \mathbf{H}, \quad (4.26)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} \doteq \mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}, \quad \mathcal{M} \doteq \mathbf{M} + \mathbf{v} \times \mathbf{P},$$

zdefiniowane na przykład w [44] i w [82], $\boldsymbol{\varepsilon}$ – pseudotensor Ricci, $\boldsymbol{\mathcal{J}}$ – wektor gęstości prądu elektrycznego w ruchomym układzie odniesienia

$$\boldsymbol{\mathcal{J}} \doteq \mathbf{J} - \tilde{q}_f \mathbf{v}, \quad (4.27)$$

gdzie \mathbf{J} – wektor gęstości prądu elektrycznego, a \tilde{q}_f – rozkład swobodnego ładunku elektrycznego. Ciało podlega wpływowi pola elektrycznego $\mathbf{E} = \mathbf{E}(\mathbf{x}, t)$ i indukcji magnetycznej $\mathbf{B} = \mathbf{B}(\mathbf{x}, t)$.

Równanie (4.21) i nierówność (4.23) wynikają z procesu lokalizacji globalnych praw termodynamiki [46], [47], [48] i są spełnione w każdym punkcie continuum mikropolarnego $\mathcal{G}(t)$. Podobnie, warunki brzegowe (4.22) i (4.24) są spełnione na dowolnej powierzchni nieciągłości $\Sigma(t)$, przemieszczającej się przez continuum $\mathcal{G}(t)$ i poruszającej się z prędkością $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$.

4.3. Oddziaływanie z polem elektromagnetycznym ciała doskonale czarnego

Rozważmy teraz przypadek continuum mikropolarnego znajdującego się w próżni wypełnionej polem elektromagnetycznym generowanym przez ciało doskonale czarne. W takiej sytuacji, warunki brzegowe (4.22) i (4.24) na granicy ciała $\partial\mathcal{G}(t)$ przybierają następującą postać:

$$\mathbf{n} \cdot \left[\frac{1}{2}(\varepsilon_0 \mathbf{E}^+ \cdot \mathbf{E}^+ + \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B}^+ \cdot \mathbf{B}^+) \mathbf{u} + \mathbf{q}^+ - \mathcal{S}^+ \right] = \quad (4.28)$$

$$-\mathbf{n} \cdot \left[(\mathbf{t}^- + {}_M \mathbf{t}^- + \mathbf{u} \otimes \mathbf{G}^-) \cdot \mathbf{v}^- + \mathbf{m}^- \cdot \boldsymbol{\omega}^- + \mathbf{q}^- - \mathcal{S}^- \right],$$

$$\mathbf{n} \cdot \llbracket \mathbf{s} \rrbracket \leq 0, \quad (4.29)$$

gdzie $\llbracket F \rrbracket \doteq F^+ - F^-$ oznacza skok na powierzchni $\Sigma(t)$ pomiędzy wartością zewnętrzną F^+ a wartością wewnętrzną F^- pola F .

Układ zamknięty $\mathcal{G}(t)$ ($\mathbf{u} = \mathbf{v}|_{\partial\mathcal{G}(t)}$) jest w kontakcie ze swym otoczeniem $\mathcal{G}^*(t)$ poprzez powierzchnię $\partial\mathcal{G}(t)$. Otoczenie pełni rolę rezerwuaru wypełnionego promieniowaniem ciała doskonale czarnego o stałej temperaturze T^* , a ponadto ma szereg innych cech niezależnych od czasu, np. $\rho^* = 0$, $\mathbf{j}^* = 0$. Mamy więc

$$\nabla T^* = \mathbf{0}, \quad \frac{\partial T^*}{\partial t} = 0. \quad (4.30)$$

Ruch układu $\mathcal{G}(t)$ jest opisany równaniami ruchu

$$x^k = x^k(\mathbf{X}, t), \quad X^K = X^K(\mathbf{x}, t). \quad (4.31)$$

Tutaj \mathbf{X} jest początkowym położeniem punktu materialnego, który w chwili czasu t zajmuje położenie \mathbf{x} . Wewnętrzne stopnie swobody ośrodka mikropolarnego spełniają równania

$$\xi^k = \chi^k{}_K(\mathbf{X}, t) \Xi^K, \quad \Xi^K = \chi_k{}^K(\mathbf{x}, t) \xi^k, \quad (4.32)$$

ruchu obrotowego direktora Ξ przyczepionego do punktu materialnego \mathbf{X} [46]. Związki (4.32)₁ i (4.32)₂ są wzajemnie odwrotne, a $\boldsymbol{\chi}$ (mikroruch), jest tensorem ortogonalnym ($\boldsymbol{\chi}^{-1} = \boldsymbol{\chi}^T$, $\det \boldsymbol{\chi} = 1$). Tak więc,

$$\begin{aligned} x^k{}_{,K} X^K{}_{,l} &= \delta_l^k, & X^K{}_{,k} x^k{}_{,L} &= \delta_L^K, \\ \chi^k{}_K \chi_l{}^K &= \delta_l^k, & \chi^k{}_L \chi_k{}^K &= \delta_L^K. \end{aligned} \quad (4.33)$$

Energję ośrodka mikropolarnego wyrazimy przez poniższe tensory deformacji [46]:

– tensory deformacji Cosserat \mathfrak{C}_{KL} i \mathfrak{c}_{kl}

$$\mathfrak{C}_{KL} \doteq x^k{}_{,K} \chi_{kL}, \quad \mathfrak{c}_{kl} \doteq X^K{}_{,k} \chi_{lK}, \quad (4.34)$$

– tensory deformacji giętno-skłębne Γ_{KL} i γ_{kl}

$$\Gamma_{KL} \doteq \frac{1}{2} \varepsilon_{KMN} \chi^{kM}{}_{,L} \chi_k{}^N, \quad \gamma_{lk} \doteq \frac{1}{2} \varepsilon_{lmn} \chi^{mK} \chi^n{}_{K,k}. \quad (4.35)$$

Mając te wzory do dyspozycji, możemy wypisać następujące równania (porównaj (4.25)):

$$\begin{aligned} \gamma_{lk} &= X^K{}_{,k} \chi_l{}^L \Gamma_{LK}, \\ a_{kl} &= X^K{}_{,k} \chi_l{}^L \dot{\mathfrak{C}}_{KL}, \\ b_{lk} &= X^K{}_{,k} \chi_l{}^L \dot{\Gamma}_{LK}. \end{aligned} \quad (4.36)$$

Jednym z założeń, jakie musimy zrobić by osiągnąć zamierzony cel, czyli by móc sformułować kryterium ewolucji, jest przyjęcie, że siły masowe $\tilde{\mathbf{f}}$ są potencjalne i niezależne od czasu, czyli że

$$\tilde{\mathbf{f}} = -\nabla \tilde{g}, \quad \frac{\partial \tilde{g}}{\partial t} = 0, \quad (4.37)$$

a więc że $\tilde{g} = \tilde{g}(\mathbf{x})$. Momenty sił masowych $\tilde{\mathbf{l}}$ mogą być reprezentowane przez analogiczną funkcję $\tilde{\lambda} = \tilde{\lambda}(\boldsymbol{\xi})$, tak aby zachodziło

$$\tilde{\mathbf{l}} = \frac{d\tilde{\lambda}}{d\boldsymbol{\xi}} \times \boldsymbol{\xi}. \quad (4.38)$$

Zgodnie ze wzorem (4.32), $\boldsymbol{\xi}$ jest direktorem przyczepionym do każdego punktu \mathbf{x} ciała mikropolarnego. Jeżeli $\boldsymbol{\omega}$ jest prędkością kątową, czyli

$$\dot{\boldsymbol{\xi}} = \boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{\xi}, \quad (4.39)$$

to

$$\tilde{\mathbf{l}} \cdot \boldsymbol{\omega} = -\dot{\tilde{\lambda}}. \quad (4.40)$$

Zastosujemy teraz procedurę przedstawioną w pracy Muschika i Papenfuss [101]. Mnożymy (4.14) przez (stałą) zewnętrzną temperaturę T^* i obliczamy różnicę z (4.13), co w wyniku daje termodynamiczną nierówność

$$\begin{aligned} & \frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{G}(t)} \left[\rho (T^* \eta - \epsilon - \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} - \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\omega}) \right. \\ & \qquad \qquad \qquad \left. - \frac{1}{2} (\epsilon_0 \mathbf{E} \cdot \mathbf{E} + \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B} \cdot \mathbf{B}) \right] dV \\ & + \oint_{\partial \mathcal{G}(t)} \mathbf{n} \cdot [(\mathbf{t} + {}_m \mathbf{t} + \mathbf{v} \otimes \mathbf{G}) \cdot \mathbf{v} + \mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\omega} + \mathbf{q} - \mathcal{S} - T^* \mathbf{s}] dA \\ & + \int_{\mathcal{G}(t)} \rho (\tilde{\mathbf{f}} \cdot \mathbf{v} + \tilde{\mathbf{l}} \cdot \boldsymbol{\omega} + \tilde{h} - T^* \tilde{b}) dV \geq 0. \end{aligned} \quad (4.41)$$

W [101] pokazano, że nierówność

$$\oint_{\partial \mathcal{G}(t)} \mathbf{n} \cdot (T^* \mathbf{s} - \mathbf{q}) dA \geq 0, \quad (4.42)$$

zachodzi zawsze. Jeśli przyjmie się dodatkowe założenie, że proces jest bezźródłowy, czyli że $\tilde{h} = 0$ i że również $\tilde{b} = 0$, to jest to wystarczający warunek, aby otrzymać równanie ewolucji. Z (4.41) wynika, że można osłabić założenie Muschika i Papenfuss przyjmując następującą nierówność

$$\int_{\mathcal{G}(t)} \rho (T^* \tilde{b} - \tilde{h}) dV + \oint_{\partial \mathcal{G}(t)} \mathbf{n} \cdot (T^* \mathbf{s} - \mathbf{q}) dA \geq 0, \quad (4.43)$$

prawdziwą tylko dla niektórych postaci źródeł zewnętrznych. Zauważmy, że w termodynamice ośrodków ciągłych zakłada się zazwyczaj, iż [47], [48]

$$\mathbf{s} = \frac{1}{T} \mathbf{q} + \mathbf{s}', \quad \text{i} \quad T = \frac{\tilde{h}}{\tilde{b}}, \quad (4.44)$$

gdzie $T = T(\mathbf{x}, t)$ jest temperaturą absolutną ciała. Funkcja \mathbf{s}' jest naddatkiem w stosunku do klasycznej wartości strumienia entropii \mathbf{q}/T , który jest różny od zera np. dla mieszanin złożonych materiałów (zazwyczaj $\mathbf{s}' = \mathbf{0}$)¹.

¹ Tu chcemy uniknąć wprowadzenia pola temperatury dla układów nierównowagowych $\mathcal{G}(t)$.

Uwzględniając założenia (4.37), (4.40) i (4.43) przekształcamy (4.41) do następującej postaci:

$$\begin{aligned} & \frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{G}(t)} [\rho(T^* \eta - \epsilon - \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} - \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\omega} - \tilde{g} - \tilde{\lambda}) \\ & \quad - \frac{1}{2} (\epsilon_0 \mathbf{E} \cdot \mathbf{E} + \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B} \cdot \mathbf{B})] dV \\ & + \oint_{\partial \mathcal{G}(t)} \mathbf{n} \cdot [(\mathbf{t} + {}_M \mathbf{t} + \mathbf{v} \otimes \mathbf{G}) \cdot \mathbf{v} + \mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\omega} - \mathbf{S}] dA \geq 0. \end{aligned} \quad (4.45)$$

Z warunku brzegowego (4.22) wynika, że

$$\begin{aligned} & \oint_{\partial \mathcal{G}(t)} \mathbf{n} \cdot [(\mathbf{t} + {}_M \mathbf{t} + \mathbf{v} \otimes \mathbf{G}) \cdot \mathbf{v} + \mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\omega} - \mathbf{S}] dA = \\ & \oint_{\partial \mathcal{G}(t)} \mathbf{n} \cdot \left\{ \frac{1}{2} (\epsilon_0 \mathbf{E}^* \cdot \mathbf{E}^* + \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B}^* \cdot \mathbf{B}^*) \mathbf{u} - \frac{1}{\mu_0} \mathbf{E}^* \times \mathbf{B}^* + [\mathbf{q}] \right\} dA. \end{aligned} \quad (4.46)$$

Założmy teraz, że \mathbf{E}^* , \mathbf{B}^* są ciągłymi polami zadanymi w $\mathcal{G}(t) \cup \mathcal{G}^*$ i spełniającymi bezźródłowe równania Maxwella w $\mathcal{G}(t)$

$$\nabla \times \mathbf{E}^* + \mathbf{B}^*_{,t} = \mathbf{0}, \quad \frac{1}{\mu_0} \nabla \times \mathbf{B}^* - \epsilon_0 \mathbf{E}^*_{,t} = \mathbf{0}. \quad (4.47)$$

Korzystając z twierdzenia Greena–Gaussa–Ostrogradskiego i z równania transportu

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{G}(t)} F dV = \int_{\mathcal{G}(t)} \frac{\partial F}{\partial t} dV + \oint_{\partial \mathcal{G}(t)} \mathbf{n} \cdot (F \mathbf{v}) dA, \quad (4.48)$$

otrzymujemy po prostych przekształceniach, że

$$\begin{aligned} & \oint_{\partial \mathcal{G}(t)} \mathbf{n} \cdot \left[\frac{1}{2} (\epsilon_0 \mathbf{E}^* \cdot \mathbf{E}^* + \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B}^* \cdot \mathbf{B}^*) \mathbf{u} - \frac{1}{\mu_0} \mathbf{E}^* \times \mathbf{B}^* \right] dA = \\ & \frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{G}(t)} \frac{1}{2} (\epsilon_0 \mathbf{E}^* \cdot \mathbf{E}^* + \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B}^* \cdot \mathbf{B}^*) dV. \end{aligned} \quad (4.49)$$

Muschik i Papenfuss [101] dochodzą do wniosku, że

$$\oint_{\partial\mathcal{G}(t)} \mathbf{n} \cdot \mathbf{s} dA \geq \frac{1}{T^*} \oint_{\partial\mathcal{G}(t)} \mathbf{n} \cdot \mathbf{q} dA. \quad (4.50)$$

Z powyższej nierówności i z (4.14) wynika, że na granicy $\partial\mathcal{G}$

$$-\frac{1}{T^*} \mathbf{n} \cdot \llbracket \mathbf{q} \rrbracket \geq 0. \quad (4.51)$$

Korzystając z tego argumentu, otrzymujemy ostatecznie *kryterium ewolucji* w postaci

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{G}(t)} [\rho(T^* \eta - \epsilon - \mathbf{\kappa} e - \tilde{g} - \tilde{\lambda}) - (\mathbf{\mu} \epsilon - \mathbf{\mu} \epsilon^*)] dV \geq 0, \quad (4.52)$$

gdzie $\rho \mathbf{\kappa} e$ – energia kinetyczna ośrodka mikropolarnego o gęstości

$$\mathbf{\kappa} e \doteq \frac{1}{2} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\omega}), \quad (4.53)$$

i

$$\mathbf{\mu} \epsilon^* \doteq \frac{1}{2} (\varepsilon_0 \mathbf{E}^* \cdot \mathbf{E}^* + \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B}^* \cdot \mathbf{B}^*), \quad (4.54)$$

gęstość Lagrange’a pól elektromagnetycznych otoczenia.

Powyższe kryterium ewolucji (4.52) można zastosować do określenia warunków równowagi termodynamicznej ciał deformowalnych podlegających działaniu promieniowania ciała doskonale czarnego. W następnym podrozdziale zastosujemy ten formalizm do znalezienia kryterium ewolucji dla ciekłych kryształów.

4.3.1. Warunki równowagi dla ciekłych kryształów

Użyjemy opisu ośrodków mikropolarnych zaproponowanego przez Eringenę. Podstawowe równania opisujące ciekły kryształ podlegający oddziaływaniu z polem elektromagnetycznym mają wewnątrz ciała następująca postać [44], [82], [81]:

– prawo zachowania masy

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (4.55)$$

– prawo zachowania mikropędu

$$\frac{D\mathbf{j}}{Dt} + \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{j} - \mathbf{j} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\omega} = \mathbf{0}, \quad (4.56)$$

– prawo zachowania pędu

$$-\rho \dot{\mathbf{v}} + \nabla \cdot \mathbf{t} + {}_{\mathbf{M}}\mathbf{f} + \rho \tilde{\mathbf{f}} = \mathbf{0}, \quad (4.57)$$

– prawo zachowania momentu pędu

$$-\rho \dot{\boldsymbol{\sigma}} + \nabla \cdot \mathbf{m} + \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{t} + {}_{\mathbf{M}}\mathbf{l} + \rho \tilde{\mathbf{l}} = \mathbf{0}, \quad (4.58)$$

– prawo Faradaya

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \nabla \times \mathbf{E} = \mathbf{0}, \quad (4.59)$$

– prawo Gaussa (magnetyczne)

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (4.60)$$

– prawo Gaussa (elektryczne)

$$q_f - \nabla \cdot \mathbf{D} = 0, \quad (4.61)$$

– prawo Ampera

$$\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} - \nabla \times \mathbf{H} + \mathbf{J} = \mathbf{0}, \quad (4.62)$$

gdzie ${}_{\mathbf{M}}\mathbf{f} = \nabla \cdot {}_{\mathbf{M}}\mathbf{t} - \mathbf{G}_{,t}$, ${}_{\mathbf{M}}\mathbf{l} = \boldsymbol{\varepsilon} : {}_{\mathbf{M}}\mathbf{t}^T$, $\mathbf{G} \doteq \varepsilon_0 \mathbf{E} \times \mathbf{B}$, a ${}_{\mathbf{M}}\mathbf{t}$ jest tensorem naprężenia Maxwella zdefiniowanym następująco:

$${}_{\mathbf{M}}\mathbf{t} \doteq \mathbf{P} \otimes \boldsymbol{\varepsilon} - \mathbf{B} \otimes \mathcal{M} + \varepsilon_0 \mathbf{E} \otimes \mathbf{E} + \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B} \otimes \mathbf{B} - ({}_{\mathbf{M}}\epsilon - \mathcal{M} \cdot \mathbf{B}) \mathbf{I}. \quad (4.63)$$

Zgodnie z definicją stanu równowagi układu dyskretnego $\mathcal{G}(t)$ istnieje taki globalny układ odniesienia (\mathbf{x}', t) [101], w którym znikają wszystkie pochodne materialne względem czasu (jak prędkość liniowa $\mathbf{v}(\mathbf{x}', t)$ i prędkość kątowna $\boldsymbol{\omega}(\mathbf{x}', t)$), gradient temperatury absolutnej $\nabla' T(\mathbf{x}', t)$, wektor ciepła $\mathbf{q}(\mathbf{x}', t)$, prąd elektryczny $\mathcal{J}(\mathbf{x}', t)$, źródło energii $\tilde{h}(\mathbf{x}', t)$, dopływ entropii $\tilde{b}(\mathbf{x}', t)$. Znikają również wszystkie pochodne cząstkowe względem

czasu. Zakładamy dodatkowo, że prawdziwy jest aksjomat obiektywności materialnej.

Z kryterium ewolucji (4.52) wynika, że w stanie równowagi następujący funkcjonał

$$L = \int_{\mathcal{G}'} [\rho(T^* \eta - \epsilon - \tilde{g} - \tilde{\lambda}) - ({}_{\mathbf{M}}\epsilon - {}_{\mathbf{M}}\epsilon^*)] dV', \quad (4.64)$$

osiąga maksimum (ponieważ nie jest malejący), co oznacza, że

$$\delta L = 0. \quad (4.65)$$

Zakładamy, że wektory $\mathbf{E}(\mathbf{E}^*)$ i $\mathbf{B}(\mathbf{B}^*)$ można wyrazić za pomocą potencjałów wektorowych $\mathbf{A}(\mathbf{x}')(\mathbf{A}^*(\mathbf{x}'))$ i potencjałów skalarnych $\varphi(\mathbf{x}')(\varphi^*(\mathbf{x}'))$:

$$\mathbf{E} = \nabla' \varphi, \quad \mathbf{B} = \nabla' \times \mathbf{A}, \quad (4.66)$$

$$\mathbf{E}^* = \nabla' \varphi^*, \quad \mathbf{B}^* = \nabla' \times \mathbf{A}^*. \quad (4.67)$$

Można pokazać [66], że z założeń (4.66)₁, (4.67)₁ i z elektrycznego prawa Gaussa (4.61), wynika że

$$\int_{\mathcal{G}'} (\mathbf{D} \cdot \mathbf{E} - \mathbf{D}^* \cdot \mathbf{E}^*) dV' = - \int_{\mathcal{G}'} q_f \varphi dV' - \oint_{\partial \mathcal{G}'} \omega_f \varphi dA', \quad (4.68)$$

gdzie \mathbf{D} – wektor przemieszczenia dielektrycznego ($\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}$ w \mathcal{G}' i $\mathbf{D}^* = \varepsilon_0 \mathbf{E}^*$ w $\mathcal{G}' \cup \mathcal{G}^*$), q_f – rozkład swobodnego ładunku elektrycznego w \mathcal{G}' , a ω_f – rozkład swobodnego elektrycznego ładunku powierzchniowego na $\partial \mathcal{G}'$ (nie ma ładunków swobodnych w \mathcal{G}^*). Zakładamy ponadto, że $\varphi = \varphi^*$ na $\partial \mathcal{G}'$. Biorąc pod uwagę (4.68), funkcjonał (4.64) można zapisać w postaci

$$L = - \int_{\mathcal{G}'} [\rho(\psi^{(*)} + \tilde{g} + \tilde{\lambda}) - ({}_{\mathbf{M}}\epsilon - {}_{\mathbf{M}}\epsilon^*) - q_f \varphi] dV' + \oint_{\partial \mathcal{G}'} \omega_f \varphi dA', \quad (4.69)$$

gdzie $\psi^{(*)}$ jest funkcją termodynamiczną o postaci

$$\psi^{(*)} \doteq \epsilon - T^* \eta - \frac{1}{\rho} \mathbf{P} \cdot \mathbf{E}. \quad (4.70)$$

Wielkość $\psi^{(*)}$ jest funkcjonałem zależnym od konkretnego zbioru zmiennych niezależnych. W przypadku gdy układ znajduje się w stanie równowagi termodynamicznej, $\psi^{(*)}$ przyjmuje postać [44], [82]

$$\psi^{(*)} = \psi^{(*)}(\rho^{-1}, \mathbf{j}, \boldsymbol{\gamma}, T, \mathbf{E}, \mathbf{B}), \quad (4.71)$$

gdzie \mathbf{j} – tensor mikrobezładności, $\boldsymbol{\gamma}$ – tensor deformacji giętno-skrotnej, a T – termostatyczna temperatura ciekłego kryształu. W podejściu wariacyjnym [82] zakłada się, że wariacje $\delta \mathbf{x}'$, $\delta \phi^*$, $\delta \mathbf{A}^*$ są niezależnymi ciągłymi funkcjami w całej przestrzeni V , $\delta \phi$, $\delta \mathbf{A}$ są niezależnymi ciągłymi funkcjami w \mathcal{G}' , a $\delta \phi = \delta \phi^*$, $\delta \mathbf{A} = \delta \mathbf{A}^*$ w $\partial \mathcal{G}'$. W ośrodkach mikropolarnych definiujemy w \mathcal{G}' wariację kątową $\delta \boldsymbol{\kappa}$ poniższym równaniem [81], [82]:

$$\delta \boldsymbol{\xi} = \delta \boldsymbol{\kappa} \times \boldsymbol{\xi}. \quad (4.72)$$

Podstawowe założenie podejścia wariacyjnego [81]

$$\delta \mathbf{X} = \mathbf{0}, \quad (4.73)$$

pozwala napisać następujące ważne wzory:

$$\begin{aligned} \delta \rho^{-1} &= \rho^{-1} \boldsymbol{\nabla}' \cdot \delta \mathbf{x}', \\ \delta \mathbf{j} &= \mathbf{j} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \delta \boldsymbol{\kappa} - \delta \boldsymbol{\kappa} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{j}, \\ \delta \boldsymbol{\gamma} &= -\boldsymbol{\gamma} \cdot (\boldsymbol{\nabla}' \otimes \delta \mathbf{x}')^T + (\boldsymbol{\nabla}' \otimes \delta \boldsymbol{\kappa})^T + \boldsymbol{\varepsilon} : (\delta \boldsymbol{\kappa} \otimes \boldsymbol{\gamma}), \\ \delta \mathbf{E} &= \boldsymbol{\nabla}'(\delta \phi) - \mathbf{E} \cdot (\boldsymbol{\nabla}' \otimes \delta \mathbf{x}')^T, \\ \delta \mathbf{B} &= \boldsymbol{\nabla}' \times \hat{\delta} \mathbf{A} + (\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\nabla}') \delta \mathbf{x}' - \mathbf{B}(\boldsymbol{\nabla}' \cdot \delta \mathbf{x}'), \\ \delta \mathbf{E}^* &= \boldsymbol{\nabla}'(\delta \phi^*) - \mathbf{E}^* \cdot (\boldsymbol{\nabla}' \otimes \delta \mathbf{x}')^T, \\ \delta \mathbf{B}^* &= \boldsymbol{\nabla}' \times \hat{\delta} \mathbf{A}^* + (\mathbf{B}^* \cdot \boldsymbol{\nabla}') \delta \mathbf{x}' - \mathbf{B}^*(\boldsymbol{\nabla}' \cdot \delta \mathbf{x}'), \end{aligned} \quad (4.74)$$

gdzie niezmiennicze względem cechowania wariacje Weissa $\hat{\delta} \mathbf{A}$ ($\hat{\delta} \mathbf{A}^*$) dane są wzorami

$$\hat{\delta} \mathbf{A} \doteq \delta \mathbf{A} - (\boldsymbol{\nabla}' \otimes \mathbf{A})^T \cdot \delta \mathbf{x}', \quad \hat{\delta} \mathbf{A}^* \doteq \delta \mathbf{A}^* - (\boldsymbol{\nabla}' \otimes \mathbf{A}^*)^T \cdot \delta \mathbf{x}'. \quad (4.75)$$

Ponadto

$$\begin{aligned} \delta \int_{\mathcal{G}'} \rho (\tilde{g} + \tilde{\lambda}) dV' &= - \int_{\mathcal{G}'} \rho (\tilde{\mathbf{f}} \cdot \delta \mathbf{x}' + \tilde{\mathbf{l}} \cdot \delta \boldsymbol{\kappa}) dV', \\ \delta \int_{\mathcal{G}'} q_f \varphi dV' + \delta \oint_{\partial \mathcal{G}'} \omega_f \varphi dA' &= \int_{\mathcal{G}'} q_f \delta \varphi dV' + \oint_{\partial \mathcal{G}'} \omega_f \delta \varphi dA'. \end{aligned} \quad (4.76)$$

Ostatni wzór wynika z elektrycznego prawa Gaussa, które stwierdza, że

$$\int_{\mathcal{G}'} q_f dV' + \oint_{\partial \mathcal{G}'} \omega_f dA' = 0. \quad (4.77)$$

Uwzględniając powyższe wyrażenia, zagadnienie wariacyjne (4.65) przyjmuje postać

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{G}'} [\rho (-\delta \psi^{(*)}) + \tilde{\mathbf{f}} \cdot \delta \mathbf{x}' + \tilde{\mathbf{l}} \cdot \delta \boldsymbol{\kappa}] + \delta (\mathbf{m} \epsilon - \mathbf{m} \epsilon^*) \\ + (\mathbf{m} \epsilon - \mathbf{m} \epsilon^*) \boldsymbol{\nabla}' \cdot \delta \mathbf{x}' + q_f \delta \varphi] dV' + \oint_{\partial \mathcal{G}'} \omega_f \delta \varphi dA' = 0, \end{aligned} \quad (4.78)$$

gdzie

$$\delta \psi^{(*)} = \frac{\partial \psi^{(*)}}{\partial \mathbf{y}} \cdot \delta \mathbf{y}, \quad (4.79)$$

i

$$\mathbf{y} \doteq (\rho^{-1}, \mathbf{j}, \boldsymbol{\gamma}, T, \mathbf{E}, \mathbf{B}). \quad (4.80)$$

Wprowadźmy następujące równania konstytutywne [44]

$$\begin{aligned} \pi = -\frac{\partial \psi^{(*)}}{\partial \rho^{-1}}, \quad \mathbf{m} = \rho \frac{\partial \psi^{(*)}}{\partial \boldsymbol{\gamma}^T}, \quad \mathbf{t} = -\pi \mathbf{I} - \mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\gamma}, \\ \mathbf{P} = -\rho \frac{\partial \psi^{(*)}}{\partial \mathbf{E}}, \quad \mathbf{M} = -\rho \frac{\partial \psi^{(*)}}{\partial \mathbf{B}}, \end{aligned} \quad (4.81)$$

gdzie π – ciśnienie termostatyczne, \mathbf{t} i \mathbf{m} – odpowiednio tensory naprężenia równowagowego i naprężenia momentowego. Wykorzystując związki konstytutywne (4.81), równania (4.74), obiektywność materialną i założenie o ciągłości wariacji, otrzymujemy pełen układ równań elektro - magneto - statyki ciekłych kryształów w stanie równowagi termodynamicznej:

$$\boldsymbol{\nabla}' \cdot \mathbf{t} + \mathbf{m} \mathbf{f} + \rho \tilde{\mathbf{f}} = \boldsymbol{\nabla}' \cdot \mathbf{m} \mathbf{t}^* = \mathbf{0}, \quad (4.82)$$

$$\nabla' \cdot \mathbf{m} + \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{t} + {}_{\mathbf{M}}\mathbf{l} + \rho \tilde{\mathbf{l}} = \mathbf{0}, \quad (4.83)$$

$$\nabla' \cdot \mathbf{D} = q_f, \quad \varepsilon_0 \nabla' \cdot \mathbf{E}^* = 0, \quad (4.84)$$

$$\nabla' \times \mathbf{H} = \mathbf{0}, \quad \nabla' \times \mathbf{B}^* = \mathbf{0}, \quad (4.85)$$

z warunkami brzegowymi na $\partial\mathcal{G}'$

$$\begin{aligned} \mathbf{n}' \cdot (\mathbf{t} - \llbracket \mathbf{t} \rrbracket) &= \mathbf{0}, \\ \mathbf{n}' \cdot \mathbf{m} &= \mathbf{0}, \\ \mathbf{n}' \cdot \llbracket \mathbf{D} \rrbracket &= \omega_f, \\ \mathbf{n}' \times \llbracket \mathbf{H} \rrbracket &= \mathbf{0}, \end{aligned} \quad (4.86)$$

gdzie ${}_{\mathbf{M}}\mathbf{f} = \nabla' \cdot {}_{\mathbf{M}}\mathbf{t}$, ${}_{\mathbf{M}}\mathbf{l} = \boldsymbol{\varepsilon} : {}_{\mathbf{M}}\mathbf{t}^T$ i

$$\begin{aligned} {}_{\mathbf{M}}\mathbf{t} &= \mathbf{D} \otimes \mathbf{E} + \mathbf{B} \otimes \mathbf{H} - \frac{1}{2}[(\mathbf{D} - \mathbf{P}) \cdot \mathbf{E} + \mathbf{B} \cdot (\mathbf{H} - \mathbf{M})]\mathbf{I}, \\ {}_{\mathbf{M}}\mathbf{t}^* &= \varepsilon_0 \mathbf{E}^* \otimes \mathbf{E}^* + \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B}^* \otimes \mathbf{B}^* - {}_{\mathbf{M}}\boldsymbol{\varepsilon}^* \mathbf{I}. \end{aligned} \quad (4.87)$$

Oprócz równań (4.82) – (4.85) otrzymujemy jeszcze jedno dodatkowe równanie (jeśli $\delta T \neq 0$):

$$\frac{\partial \psi^{(*)}}{\partial T} = 0. \quad (4.88)$$

Jeśli uwzględnimy teraz funkcję energii swobodnej Helmholtza ψ w zwyczajnej postaci [44], [47], [48]:

$$\psi = \epsilon - T\eta - \frac{1}{\rho} \mathbf{P} \cdot \mathbf{E}, \quad (4.89)$$

wtedy otrzymamy

$$\psi^{(*)} = \psi + (T - T^*)\eta. \quad (4.90)$$

Energia swobodna ψ jest potencjałem dla entropii, czyli

$$\eta = -\frac{\partial \psi}{\partial T}. \quad (4.91)$$

Uwzględniając równania (4.89) – (4.91) otrzymujemy z (4.88) i (4.81) następujące ograniczenie

$$(T - T^*) \frac{\partial \eta}{\partial T} = 0. \quad (4.92)$$

W ten sposób otrzymaliśmy wynik, potwierdzający nasze przypuszczenia, że w stanie równowagi temperatura termostatyczna ciekłego kryształu równa jest temperaturze otoczenia ($T = T^*$).

4.4. Ciało zanurzone w cieczy dielektrycznej

W niniejszym podrozdziale omówimy drugi przypadek skonstruowanego przez nas kryterium ewolucji [83] dla ciał mikropolarnych oddziałujących z zewnętrznym polem elektromagnetycznym o wektorach \mathbf{E}^* i \mathbf{B}^* . Tym razem otoczeniem ciała mikropolarnego (jako przykłady wybierzemy sprężyste ciało mikropolarne, ciecz mikropolarną i ciekły kryształ) będzie ciecz dielektryczna o stałej temperaturze T^* .

Niech, jak poprzednio, powierzchnia $\partial\mathcal{G}(t)$, z dodatnio skierowanym wektorem jednostkowym $\mathbf{n}(\mathbf{x}, t)$, porusza się z prędkością $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$. Na powierzchni $\partial\mathcal{G}(t)$ rozkład swobodnego ładunku elektrycznego wynosi $\tilde{\omega}_f(\mathbf{x}, t)$, a gęstość powierzchniowego ładunku elektrycznego $\tilde{\mathcal{K}}(\mathbf{x}, t)$ jest określona wzorem

$$\tilde{\mathcal{K}} \doteq \tilde{\mathbf{K}} - \tilde{\omega}_f \mathbf{u}, \quad (4.93)$$

gdzie $\tilde{\mathbf{K}}$ – wektor powierzchniowej gęstości prądu elektrycznego. Warunki brzegowe (4.22) i (4.24) tutaj również służą jako warunki brzegowe na $\partial\mathcal{G}(t)$. Stan równowagi otoczenia dany jest przez następujące równania konstytutywne [48]

$$\begin{aligned} \mathbf{t}^* &= -\pi^* \mathbf{I}, \\ \pi^* &= \pi_0^* + \frac{1}{2} \mathbf{P}^* \cdot \mathbf{E}^*, \\ \mathbf{P}^* &= \chi^* \mathbf{E}^*, \\ \mathbf{D}^* &= \varepsilon^* \mathbf{E}^*, \quad \mathbf{H}^* = \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B}^*, \\ {}_{\mathbf{M}}\mathbf{t}^* &= \mathbf{D}^* \otimes \mathbf{E}^* + \mathbf{H}^* \otimes \mathbf{B}^* - {}_{\mathbf{M}}\epsilon^* \mathbf{I}, \\ {}_{\mathbf{M}}\epsilon^* &\doteq \frac{1}{2} (\varepsilon_0 \mathbf{E}^* \cdot \mathbf{E}^* + \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B}^* \cdot \mathbf{B}^*), \end{aligned} \quad (4.94)$$

gdzie \mathbf{t}^* – tensor naprężenia Cauchy, π^* – ciśnienie termodynamiczne cieczy dielektrycznej, π_0^* – stałe ciśnienie jednorodnej cieczy dielektrycznej w nieobecności pól elektromagnetycznych, \mathbf{P}^* – wektor polaryzacji, χ^* –

(stała) podatność dielektryczna w \mathcal{G}^* , \mathbf{D}^* – wektor przemieszczenia dielektrycznego, $\varepsilon^* \doteq \varepsilon_0 + \chi^*$ – stała dielektryczna, \mathbf{H}^* – natężenie pola magnetycznego, ${}_{\mathbf{M}}\mathbf{t}^*$ – elektromagnetyczny tensor naprężenia, a ${}_{\mathbf{M}}\epsilon^*$ – gęstość swobodnej energii elektromagnetycznej.

Zauważmy, że zgodnie z prawem zachowania masy, spełniony jest warunek brzegowy na $\partial\mathcal{G}$

$$\mathbf{n} \cdot \llbracket \rho(\mathbf{v} - \mathbf{u}) \rrbracket = 0. \quad (4.95)$$

Ponieważ $\mathbf{u} = \mathbf{v}|_{\partial\mathcal{G}(t)}$, to wynika stąd, że

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}|_{\partial\mathcal{G}(t)} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}^*|_{\partial\mathcal{G}(t)}. \quad (4.96)$$

Z warunków nieciągłości na granicy $\partial\mathcal{G}(t)$ dla pierwszego prawa termodynamiki (4.21) wynika, że

$$\begin{aligned} \mathbf{n} \cdot [(\mathbf{t} + {}_{\mathbf{M}}\mathbf{t} + \mathbf{v} \otimes \mathbf{G}) \cdot \mathbf{v} + \mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\omega} + \mathbf{q} - \mathcal{S}] = \\ \mathbf{n} \cdot [(-\pi_0^* + {}_{\mathbf{M}}\epsilon^* + \mathbf{E}^* \cdot \mathbf{P}^*) \mathbf{v} - \mathbf{E}^* \times \mathbf{H}^* + \mathbf{q}^*]. \end{aligned} \quad (4.97)$$

W celu otrzymania wzoru (4.97) wykorzystaliśmy tożsamość [48]

$$\mathcal{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H} + [{}_{\mathbf{M}}\mathbf{t} + \mathbf{v} \otimes \mathbf{G} - ({}_{\mathbf{M}}\epsilon + \mathbf{E} \cdot \mathbf{P}) \mathbf{I}] \cdot \mathbf{v}, \quad (4.98)$$

i warunek brzegowy (4.96).

Rozszerzmy dziedzinę definicji pól $\mathbf{E}^*(\mathbf{x}, t)$, $\mathbf{B}^*(\mathbf{x}, t)$, $\mathbf{H}^*(\mathbf{x}, t)$ i $\mathbf{D}^*(\mathbf{x}, t)$ na $\mathcal{G}(t) \cup \mathcal{G}^*(t)$ jako rozwiązania równań Maxwella

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{E}^* + \mathbf{B}^*_{,t} = \mathbf{0}, \quad \nabla \cdot \mathbf{D}^* = 0, \\ \nabla \times \mathbf{H}^* - \mathbf{D}^*_{,t} = \mathbf{0}, \quad \nabla \cdot \mathbf{B}^* = 0, \end{aligned} \quad (4.99)$$

z warunkami ciągłości na $\partial\mathcal{G}(t)$

$$\begin{aligned} \mathbf{n} \times [\mathbf{E}^* + \mathbf{u} \times \mathbf{B}^*] = \mathbf{0}, \quad \mathbf{n} \cdot [\mathbf{D}^*] = 0, \\ \mathbf{n} \times [\mathbf{H}^* - \mathbf{u} \times \mathbf{D}^*] = \mathbf{0}, \quad \mathbf{n} \cdot [\mathbf{B}^*] = 0. \end{aligned} \quad (4.100)$$

Jeśli założymy dodatkowo, że w $\mathcal{G}(t)$

$$\mathbf{H}^* = \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B}^*, \quad \mathbf{D}^* = \varepsilon^* \mathbf{E}^*, \quad (4.101)$$

gdzie $\varepsilon^* \doteq \varepsilon_0 + \chi^*$ jest stałą dielektryczną w $\mathcal{G}^*(t)$, to możemy napisać, że

$$\oint_{\partial\mathcal{G}(t)} \mathbf{n} \cdot [(-\pi^* + {}_M\epsilon^* + \mathbf{E}^* \cdot \mathbf{P}^*) \mathbf{v} - \mathbf{E}^* \times \mathbf{H}^*] dA = \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{G}(t)} ({}_M\epsilon^* - \pi_0^*) dV. \quad (4.102)$$

Zakładamy tu, podobnie jak poprzednim podrozdziale i w pracy [121], że siły objętościowe $\tilde{\mathbf{f}}$ i momenty $\tilde{\mathbf{I}}$ mają następujące właściwości (porównaj (4.37) i (4.38)):

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{f}} &= -\nabla \tilde{g}, \quad \tilde{g} = \tilde{g}(\mathbf{x}), \quad \frac{\partial \tilde{g}}{\partial t} = 0, \\ \tilde{\mathbf{I}} &= \frac{d\tilde{\lambda}}{d\boldsymbol{\xi}} \times \boldsymbol{\xi}, \quad \tilde{\lambda} = \tilde{\lambda}(\boldsymbol{\xi}), \end{aligned} \quad (4.103)$$

gdzie $\boldsymbol{\xi}$ jest polem dyrektorów [45].

Biorąc pod uwagę równania (4.97), (4.102) i (4.103) możemy zapisać prawo zachowania energii (4.13) w postaci bardziej wygodnej w naszych dalszych rozważaniach

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{G}(t)} [\rho(\epsilon + {}_K\epsilon + \tilde{g} + \tilde{\lambda}) + {}_M\epsilon - {}_M\epsilon^* + \pi_0^*] dV = \oint_{\partial\mathcal{G}(t)} \mathbf{n} \cdot \mathbf{q}^* dA. \quad (4.104)$$

Założyliśmy tu dodatkowo, że źródło ciepła znika ($\tilde{h} = 0$).

Drugie prawo termodynamiki (4.14), w przypadku znikającego źródła entropii \tilde{b} , przyjmuje postać

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{G}(t)} \rho \eta dV \geq \oint_{\partial\mathcal{G}(t)} \mathbf{n} \cdot \mathbf{s} dA. \quad (4.105)$$

Zastosujemy tu ponownie naszą metodologię otrzymywania kryterium ewolucji, przedstawioną również w pracach [101], [121]. Mnożymy zatem nierówność (4.105) przez (stałą) temperaturę otoczenia T^* , a następnie otrzymany wynik odejmujemy od równania (4.104). W wyniku dostajemy następującą nierówność:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{G}(t)} [\rho(T^* \eta - \epsilon - {}_K e - \tilde{g} - \tilde{\lambda}) - {}_M\epsilon + {}_M\epsilon^* - \pi_0^*] dV \\ \geq \oint_{\partial\mathcal{G}(t)} \mathbf{n} \cdot (T^* \mathbf{s} - \mathbf{q}^*) dA. \end{aligned} \quad (4.106)$$

Z warunków brzegowych dla drugiego prawa termodynamiki (4.21) wynika, że na materialnej powierzchni granicznej $\partial\mathcal{G}(t)$ prawdziwa jest następująca nierówność

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{s} \geq \mathbf{n} \cdot \mathbf{s}^* . \quad (4.107)$$

Założmy, że w otoczeniu $\mathcal{G}^*(t)$ prawdziwe jest klasyczne wyrażenie na strumień entropii [48]

$$\mathbf{s}^* = \frac{1}{T^*} \mathbf{q}^* . \quad (4.108)$$

Można łatwo pokazać, że kryterium ewolucji przyjmuje teraz następującą postać

$$\frac{d}{dt} L(\mathbf{x}, t) \geq 0 , \quad (4.109)$$

gdzie potencjał kinetyczny $L(\mathbf{x}, t)$ jest zdefiniowany następująco

$$L(\mathbf{x}, t) \doteq \int_{\mathcal{G}(t)} [\rho(T^*\eta - \epsilon - \mathbf{\kappa}e - \tilde{g} - \tilde{\lambda}) - \mathbf{m}\epsilon + \mathbf{m}\epsilon^* - \pi_0^*] dV . \quad (4.110)$$

W trakcie dochodzenia do kryterium ewolucji zrobiliśmy następujące założenia:

1. otoczenie ośrodka mikropolarnego ma stałą temperaturę T^* ;
2. gęstość strumienia entropii otoczenia ośrodka mikropolarnego jest proporcjonalna do gęstości wektora ciepła (4.108);
3. gęstość działających sił mechanicznych jest konserwatywna, a momenty sił mają postać daną przez wyrażenie (4.103);
4. nie ma źródeł energii i entropii;
5. otoczenie ośrodka mikropolarnego stanowi jednorodną ciecz dielektryczną.

Jeżeli spełnione są powyższe założenia, to kryterium ewolucji (4.109) jest słuszne nawet dla procesów przebiegających daleko od stanu równowagi. W następnym podrozdziale zastosujemy otrzymane kryterium (4.109) do zbadania warunku osiągnięcia stanu równowagi przez ośrodki mikropolarne.

4.4.1. Warunki równowagi

Zgodnie z definicją stanu równowagi układu dyskretnego $\mathcal{G}(t)$ istnieje taki globalny układ odniesienia (\mathbf{x}', t) , że wszystkie pochodne czasowe i strumienie znikają, a materiał spoczywa [101]. W stanie równowagi układ

równań opisujący ewolucję ciała mikropolarnego wrażliwego na działanie pola elektromagnetycznego przechodzi w następujący układ równań w \mathcal{G}' :

$$\begin{aligned}
\nabla' \cdot (\mathbf{t} + {}_{\mathbf{M}}\mathbf{t}) + \rho \tilde{\mathbf{f}} &= \mathbf{0}, \\
\nabla' \cdot \mathbf{m} + \boldsymbol{\varepsilon} : (\mathbf{t} + {}_{\mathbf{M}}\mathbf{t}) + \rho \tilde{\mathbf{I}} &= \mathbf{0}, \\
\nabla' \times \mathbf{E} = \mathbf{0}, \quad \nabla' \times \mathbf{E}^* &= \mathbf{0}, \\
\nabla' \times \mathbf{H} = \mathbf{0}, \quad \nabla' \times \mathbf{H}^* &= \mathbf{0}, \\
\nabla' \cdot \mathbf{B} = 0, \quad \nabla' \cdot \mathbf{B}^* &= 0, \\
\nabla' \cdot \mathbf{D} = \tilde{q}_f, \quad \nabla' \cdot \mathbf{D}^* &= 0,
\end{aligned} \tag{4.111}$$

z warunkami brzegowymi na $\partial\mathcal{G}'$

$$\begin{aligned}
\mathbf{n} \cdot (\mathbf{t} + {}_{\mathbf{M}}\mathbf{t}) &= \mathbf{n} \cdot (\pi^* \mathbf{I} + {}_{\mathbf{M}}\mathbf{t}^*), \quad \mathbf{n} \cdot \mathbf{m} = \mathbf{0}, \\
\mathbf{n} \times (\mathbf{E}^* - \mathbf{E}) &= \mathbf{0}, \quad \mathbf{n} \times \llbracket \mathbf{E}^* \rrbracket = \mathbf{0}, \\
\mathbf{n} \times (\mathbf{H}^* - \mathbf{H}) &= \mathbf{0}, \quad \mathbf{n} \times \llbracket \mathbf{H}^* \rrbracket = \mathbf{0}, \\
\mathbf{n} \cdot (\mathbf{B}^* - \mathbf{B}) &= 0, \quad \mathbf{n} \cdot \llbracket \mathbf{B}^* \rrbracket = 0, \\
\mathbf{n} \cdot (\mathbf{D}^* - \mathbf{D}) &= \tilde{\omega}_f, \quad \mathbf{n} \cdot \llbracket \mathbf{D}^* \rrbracket = 0,
\end{aligned} \tag{4.112}$$

gdzie \mathbf{t} – mechaniczny tensor naprężeń, \mathbf{m} – tensor naprężeń momentowych, a

$$\begin{aligned}
{}_{\mathbf{M}}\mathbf{t} &\doteq \mathbf{D} \otimes \mathbf{E} + \mathbf{H} \otimes \mathbf{B} - ({}_{\mathbf{M}}\epsilon - \mathbf{M} \cdot \mathbf{B})\mathbf{I}, \\
{}_{\mathbf{M}}\mathbf{t}^* &\doteq \mathbf{D}^* \otimes \mathbf{E}^* + \mathbf{H}^* \otimes \mathbf{B}^* - {}_{\mathbf{M}}\epsilon^* \mathbf{I}, \\
\mathbf{D} &\doteq \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}, \quad \mathbf{H} \doteq \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B} - \mathbf{M}, \\
\mathbf{D}^* &\doteq \epsilon^* \mathbf{E}^*, \quad \mathbf{H}^* \doteq \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B}^*.
\end{aligned} \tag{4.113}$$

Potencjał kinetyczny (4.110) w układzie współrzędnych dla stanu równowagi (\mathbf{x}', t) przyjmuje postać

$$L(\mathbf{x}', t) = \int_{\mathcal{G}'} [\rho(T^* \eta - \epsilon - \tilde{g} - \tilde{\lambda}) - (\mathbf{m} \epsilon - \mathbf{m} \epsilon^* + \pi_0^*)] dV', \quad (4.114)$$

a potencjały elektromagnetyczne dla statycznego pola elektromagnetycznego dane są równaniami

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= \nabla' \varphi, & \mathbf{B} &= \nabla' \times \mathbf{A}, \\ \mathbf{E}^* &= \nabla' \varphi^*, & \mathbf{B}^* &= \nabla' \times \mathbf{A}^*. \end{aligned} \quad (4.115)$$

Potencjały \mathbf{A} i φ są funkcjami różniczkowalnymi w \mathcal{G}' , potencjały \mathbf{A}^* i φ^* są funkcjami różniczkowalnymi w $\mathcal{G}' \cup \mathcal{G}^*$, a na powierzchni granicznej $\partial\mathcal{G}'$ są sobie równe

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}^*, \quad \varphi = \varphi^*. \quad (4.116)$$

Z elektrycznego prawa Gaussa, z (4.111)₆ oraz z (4.112)₅ wynika [66], że

$$\int_{\mathcal{G}'} \tilde{q}_f dV' + \oint_{\partial\mathcal{G}'} \tilde{\omega}_f dA' = 0, \quad (4.117)$$

i

$$\int_{\mathcal{G}'} (\mathbf{D} \cdot \mathbf{E} - \mathbf{D}^* \cdot \mathbf{E}^*) dV' = - \int_{\mathcal{G}'} \tilde{q}_f \varphi dV' - \oint_{\partial\mathcal{G}'} \omega_f \varphi dA'. \quad (4.118)$$

Jeśli teraz wstawimy ostatni wynik (4.118) do wyrażenia na potencjał kinetyczny (4.114), to otrzymamy, że

$$L = - \int_{\mathcal{G}'} [\rho(\psi + \tilde{g} + \tilde{\lambda}) - (\mathbf{m} \epsilon - \mathbf{m} \epsilon^* - \pi^*) - \tilde{q}_f \varphi] dV' + \oint_{\partial\mathcal{G}'} \tilde{\omega}_f \varphi dA', \quad (4.119)$$

gdzie

$$\psi \doteq \epsilon - T^* \eta - \frac{1}{\rho} \mathbf{P} \cdot \mathbf{E}, \quad (4.120)$$

jest uogólnioną funkcją energii swobodnej Helmholtza w przypadku stałej temperatury T^* .

Podstawowe założenie rachunku wariacyjnego [81] i [82], że

$$\delta \mathbf{X} = \mathbf{0}, \quad (4.121)$$

oznacza zgodność wariacji z deformacjami ciała. Zgodnie z (4.121) możemy policzyć wariacje masy i pól elektromagnetycznych

$$\begin{aligned}\delta\rho &= -\rho \nabla' \cdot \delta\mathbf{x}', \\ \delta\mathbf{E} &= -\mathbf{E} \cdot (\nabla' \otimes \delta\mathbf{x}')^T + \nabla' (\delta\varphi), \\ \delta\mathbf{B} &= (\mathbf{B} \cdot \nabla') \delta\mathbf{x}' - \mathbf{B}(\nabla' \cdot \delta\mathbf{x}') + \nabla' \times \hat{\delta}\mathbf{A},\end{aligned}\quad (4.122)$$

gdzie niezmiennicza względem cechowania wariacja typu Weissa $\hat{\delta}\mathbf{A}$ jest definiowana jako [82]

$$\hat{\delta}\mathbf{A} \doteq \delta\mathbf{A} - (\nabla' \otimes \mathbf{A})^T \cdot \delta\mathbf{x}'. \quad (4.123)$$

Podobne wyrażenie może być zdefiniowane dla wielkości z „gwiazdką” $\delta\mathbf{E}^*$ i $\delta\mathbf{B}^*$. Z równania (4.117) i z warunków (4.103) wynika, że

$$\delta \int_{\mathcal{G}'} \tilde{q}_f \varphi dV' + \delta \oint_{\partial\mathcal{G}'} \tilde{\omega}_f \varphi dA' = \int_{\mathcal{G}'} \tilde{q}_f \delta\varphi dV' + \oint_{\partial\mathcal{G}'} \tilde{\omega}_f \delta\varphi dA', \quad (4.124)$$

i

$$\delta \int_{\mathcal{G}'} \rho(\tilde{g} + \tilde{\lambda}) dV' = - \int_{\mathcal{G}'} \rho(\tilde{\mathbf{f}} \cdot \delta\mathbf{x}' + \tilde{\mathbf{I}} \cdot \delta\boldsymbol{\kappa}) dV', \quad (4.125)$$

gdzie wariacja kątowna $\delta\boldsymbol{\kappa}$ jest zdefiniowana następująco

$$\delta\boldsymbol{\xi} = \delta\boldsymbol{\kappa} \times \boldsymbol{\xi}. \quad (4.126)$$

Biorąc pod uwagę wyniki (4.124) i (4.125), możemy napisać, że

$$\begin{aligned}\delta L &= - \int_{\mathcal{G}'} \rho \delta[\psi - \frac{1}{\rho}({}_M\epsilon - {}_M\epsilon^* - \pi^*)] dV' \\ &+ \int_{\mathcal{G}'} [\rho(\tilde{\mathbf{f}} \cdot \delta\mathbf{x}' + \tilde{\mathbf{I}} \cdot \delta\boldsymbol{\kappa}) + \tilde{q}_f \delta\varphi] dV' + \oint_{\partial\mathcal{G}'} \tilde{\omega}_f \delta\varphi dA'.\end{aligned}\quad (4.127)$$

Zauważmy, że z równań Maxwella, ze wzorów analogicznych do (4.122) na wariacje pól \mathbf{E}^* i \mathbf{B}^* , oraz z warunków (4.116) wynika, że

$$\begin{aligned}\int_{\mathcal{G}'} \rho \delta[\frac{1}{\rho}({}_M\epsilon^* + \pi^*)] dV' = \\ \oint_{\partial\mathcal{G}'} \mathbf{n} \cdot [(\pi^* \mathbf{I} + {}_M\mathbf{t}^*) \cdot \delta\mathbf{x}' - \mathbf{D}^* \delta\varphi - \mathbf{H}^* \times \hat{\delta}\mathbf{A}] dA',\end{aligned}\quad (4.128)$$

gdzie ${}_{\mathbf{M}}\mathbf{t}^*$ jest zdefiniowane przez równanie (4.113). Teraz możemy już zapisać wariację potencjału kinetycznego w bardziej wygodnej postaci

$$\begin{aligned} \delta L = & \delta \int_{\mathcal{G}'} ({}_{\mathbf{M}}\epsilon - \rho \psi) dV' + \int_{\mathcal{G}'} [\rho(\tilde{\mathbf{f}} \cdot \delta \mathbf{x}' + \tilde{\mathbf{l}} \cdot \delta \boldsymbol{\kappa}) + \tilde{q}_f \delta \varphi] dV' + \\ & \oint_{\partial \mathcal{G}'} \{ \mathbf{n} \cdot [(\pi^* \mathbf{I} + {}_{\mathbf{M}}\mathbf{t}^*) \cdot \delta \mathbf{x}' - \mathbf{D}^* \delta \varphi - \mathbf{H}^* \times \hat{\delta} \mathbf{A}] + \tilde{\omega}_f \delta \varphi \} dA'. \end{aligned} \quad (4.129)$$

Uogólniona funkcja energii swobodnej Helmholtza ψ , zdefiniowana równaniem (4.120), jest potencjałem termodynamicznym dla elektromagnetycznego ciała mikropolarnego w stanie równowagi termodynamicznej. Ten funkcjonał zależy od różnych zbiorów zmiennych konstytutywnych, różnych dla różnych materiałów [45]. Poniżej przypomnimy jego zależność funkcyjną dla mikropolarnego ciała stałego, mikropolarnej cieczy i ciekłego kryształ podlegającym działaniu pola elektromagnetycznego.

Mikropolarne elektromagnetyczne ciała stałe W przypadku mikropolarnego sprężystego ciała stałego [45]

$$\psi = \psi(\boldsymbol{\mathfrak{C}}, \boldsymbol{\Gamma}, \mathbf{E}, \mathbf{B}, \mathbf{X}), \quad (4.130)$$

gdzie $\boldsymbol{\mathfrak{C}}$ – tensor deformacji Cosserat zdefiniowany wzorem (4.34) i $\boldsymbol{\Gamma}$ – materialny tensor giętno-skrętny zdefiniowany wzorem (4.35).

Wariacje powyższych tensorów deformacji są następujące [81] i [82]:

$$\begin{aligned} \delta \boldsymbol{\mathfrak{C}}_{KL} &= x^k{}_{,K} [\chi_{lL}(\delta x^l)_{,k} + \varepsilon_{lnk} \chi^n{}_L \delta \kappa^l], \\ \delta \boldsymbol{\Gamma}_{KL} &= x^k{}_{,L} \chi_{lK}(\delta \kappa^l)_{,k}. \end{aligned} \quad (4.131)$$

Zachodzą ponadto następujące równowagowe związki konstytutywne:

$$t_{kl} \doteq \rho \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\mathfrak{C}}_{KL}} x_{k,K} \chi_{lL}, \quad (4.132)$$

$$m_{kl} \doteq \rho \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\Gamma}_{LK}} x_{k,K} \chi_{lL}, \quad (4.133)$$

$$\mathbf{P} \doteq -\rho \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{E}}, \quad \mathbf{M} \doteq -\rho \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{B}}. \quad (4.134)$$

Mikropolarne ciecze elektromagnetyczne W przypadku mikropolarnych cieczy elektromagnetycznych mamy [45]

$$\psi = \psi(\rho^{-1}, \mathbf{j}, \mathbf{E}, \mathbf{B}), \quad (4.135)$$

z dodatkowymi związkami konstytutywnymi

$$\mathbf{t} \doteq \frac{\partial \psi}{\partial \rho^{-1}} \mathbf{I}, \quad \mathbf{m} \doteq \mathbf{0}, \quad (4.136)$$

$$\mathbf{P} \doteq -\rho \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{E}}, \quad \mathbf{M} \doteq -\rho \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{B}}. \quad (4.137)$$

Ciekłe kryształy Funkcjonał ψ dla ciekłych kryształów ma postać [44]:

$$\psi = \psi(\rho^{-1}, \mathbf{j}, \boldsymbol{\gamma}, \mathbf{E}, \mathbf{B}), \quad (4.138)$$

gdzie $\boldsymbol{\gamma}$ jest przestrzennym tensorem deformacji

$$\gamma_{lk} \doteq \frac{1}{2} \varepsilon_{lmn} \chi^{mK} \chi^n_{K,k}. \quad (4.139)$$

Wariacja tego tensora dana jest wzorem [82]

$$\delta \boldsymbol{\gamma} = -\boldsymbol{\gamma} \cdot (\nabla \otimes \delta \mathbf{x})^T + \boldsymbol{\varepsilon} : \delta \boldsymbol{\kappa} \otimes \boldsymbol{\gamma} + (\nabla \otimes \delta \boldsymbol{\kappa})^T, \quad (4.140)$$

i spełnione są następujące dodatkowe związki konstytutywne:

$$\mathbf{t} \doteq \frac{\partial \psi}{\partial \rho^{-1}} \mathbf{I} - \mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\gamma}, \quad \mathbf{m} \doteq \rho \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\gamma}^T}, \quad (4.141)$$

$$\mathbf{P} \doteq -\rho \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{E}}, \quad \mathbf{M} \doteq -\rho \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{B}}. \quad (4.142)$$

Tak więc, startując z pierwszego i z drugiego prawa termodynamiki, z równań Maxwella i po dokonaniu pewnych dodatkowych założeń, otrzymano kryterium ewolucji dla procesów przebiegających daleko od stanu równowagi termodynamicznej. Kryterium to stwierdza, że pewna globalna wielkość układu nieizolowanego kontaktującego się z otoczeniem przebywającym w stanie równowagi termodynamicznej zawsze wzrasta w czasie. Tą wielkością jest zmodyfikowana elektromagnetyczna energia swobodna.

Dodatkowe warunki jakie nałożono, to: równowagowe otoczenie wypełnione promieniowaniem ciała doskonale czarnego lub cieczą dielektryczną, konserwatywność gęstości sił i oddziaływanie rozważanego ciała z otoczeniem jako czysto termiczne. W rezultacie sformułowano kryterium ewolucji rozszerzone do przypadku elektromagnetycznego.

W stanie równowagi kryterium ewolucji przyjmuje postać zagadnienia wariacyjnego, pozwalającego otrzymać równania różniczkowe opisujące rozważany system.

Rozdział 5

Opis wariacyjny termoelektrodynamiki ciekłych kryształów

Matematyczna teoria ośrodków ciągłych z wewnętrznymi stopniami swobody, zwana również teorią ośrodków polarnych, istnieje już niemal sto lat. Zainicjowała ją praca braci Cosserat [39] opublikowana w roku 1909. Teoria ta stanowiła pierwsze uogólnienie klasycznej lokalnej teorii ośrodków ciągłych, w której punktom materialnym nie nadawano żadnej wewnętrznej struktury. W kolejnych teoriach polarnych punkty materialne są traktowane albo jako sztywne cząsteczki (ośrodki mikropolarne), albo jako cząsteczki deformowalne (ośrodki mikromorficzne). Te nowe wewnętrzne stopnie swobody są modelowane albo przez sztywne albo przez deformowalne direktory przyłączone do punktów materialnych. W najprostszym przypadku, np. w teorii nematycznych ciekłych kryształów [38], [41], [89] rozważa się tylko jeden sztywny direktor związany z każdą cząsteczką ciekłego kryształu. Praktyczna możliwość zastosowania tej teorii, początkowo robiącej wrażenie bardzo abstrakcyjnej, została już wielokrotnie potwierdzona licznymi zastosowaniami technologicznymi i przemysłowymi.

Naszym celem jest przedstawienie wariacyjnej teorii ośrodków mikropolarnych poddanych działaniu pól zewnętrznych zdolnej opisywać zarówno procesy odwracalne jak i nieodwracalne. Podstawy teorii zostały sformułowane w pracach Radzikowskiej [119] i [120]. Inspiracją do nowej serii prac [81], [82], [83], a dotyczących prezentowanej tu teorii, była słynna praca Natansona [104] i metodologia zaproponowana przez Sedova [132], którzy sformułowali zasady wariacyjne dla zjawisk nieodwracalnych.

Zaproponowana zasada wariacyjna (5.1), (5.2) jest uogólnieniem zasady wariacyjnej Grota [60]. Uogólnienie polega na uwzględnieniu mikrostruktury ośrodka i oddziaływań termodynamicznych.

Jako przykład zastosowania prezentowanej teorii omówiony zostanie ciekły kryształ poddany działaniu pól termicznych i elektromagnetycznych.

Przedyskutowana będzie wielomianowa postać nierównowagowych równań konstytutywnych. Przy opisie kinematyki ośrodków mikropolarnych skorzystano z prac Eringena [44] oraz Eringena i Kafadara [46].

W poniższych podrozdziałach podano również podstawowe definicje i twierdzenia dotyczące rachunku wariacyjnego. Wielomianowe nierównowagowe związki konstytutywne dla nematycznych ciekłych kryształów otrzymane na podstawie teorii równań konstytutywnych przedstawiono w reprezentacji Lagrange'a.

5.1. Zasada wariacyjna

W prezentowanym modelu zasada wariacyjna ma postać

$$\delta I = {}_D\mathcal{U} - {}_S\mathcal{W}, \quad (5.1)$$

gdzie I – działanie Lagrange'a, a

$${}_D\mathcal{U} - {}_S\mathcal{W} = \int_{t_1}^{t_2} ({}_D U - {}_S W) dt, \quad (5.2)$$

${}_D U$ – energia dyssypowana w wirtualnym procesie, a ${}_S W$ – praca wirtualna wykonana przez przyłożone siły uogólnione.

Pierwszym krokiem w konstruowaniu modelu ośrodka ciągłego jest wybór funkcji charakteryzujących model [29]. Do tego zbioru funkcji, dla wszystkich ośrodków ciągłych, wchodzi temperatura $T(\mathbf{X}, t)$ lub inna wielkość termodynamiczna, np. entropia $\eta(\mathbf{X}, t)$, oraz prawo ruchu $x^i = x^i(\mathbf{X}, t)$. Jeśli model jest opisywany przez inne specyficzne funkcje, to modelowany ośrodek dysponuje wewnętrznymi stopniami swobody.

Do opisu ruchu potrzebne jest dokonanie wyboru odpowiedniego układu odniesienia. W przypadku kontinuum używana jest najczęściej konfiguracja odniesienia \mathcal{B}_0 ciała \mathcal{B} w chwili $t = t_0$. Ciało materialne \mathcal{B} składa się z punktów materialnych etykietowanych współrzędnymi materialnymi X^K , $K = 1, 2, 3$, zwanymi również współrzędnymi Lagrange'a. Po tym, jak każdemu punktowi materialnemu przypiszemy jego współrzędne, każdy punkt materialny staje się bytem niezależnym i różnym od wszystkich innych punktów materialnych. Ciało materialne zajmuje pewną objętość

\mathcal{V} ograniczoną powierzchnią $\partial\mathcal{V}$ w przestrzeni fizycznej V , którą identyfikujemy z 3-wymiarową przestrzenią Euklidesową \mathbb{R}^3 wyposażoną w układ współrzędnych x^k , $k = 1, 2, 3$. Te współrzędne nazywamy współrzędnymi przestrzennymi lub współrzędnymi Eulera¹. Konfiguracja odniesienia nie zależy od czasu. Konfiguracja aktualna zapisywana jest jako $x^\alpha = (x^k, t)$, gdzie $\alpha = 1, 2, 3, 4$ i $x^4 = t$ jest współrzędną czasu.

Zakładamy, że modelowany przez nas ośrodek jest wrażliwy na działanie pola elektromagnetycznego. Pole elektromagnetyczne jest obecne w całej przestrzeni i powoduje pojawienie się w ośrodku dodatkowych stopni swobody, a mianowicie magnetyzacji i elektrycznej polaryzacji.

5.2. Ciało mikropolarne i pola zewnętrzne

W każdym punkcie \mathbf{X} niezdeformowanego ciała \mathcal{B}_0 o objętości \mathcal{V}_0 i ograniczonego powierzchnią $\partial\mathcal{V}_0$ zdefiniowana jest gęstość masy $\rho_0(\mathbf{X})$. W konfiguracji aktualnej gęstość masy $\rho(\mathbf{x}, t)$ jest dana wzorem:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \rho_0(\mathbf{X}) \det(X^K_{,l}), \quad \rho_0(\mathbf{X}) = \rho(\mathbf{x}, t) \det(x^l_{,L}). \quad (5.3)$$

Przecinek przed indeksem oznacza różniczkowanie względem zmiennej reprezentowanej przez ten indeks.

Tensory mikrobezładności, materialny $\mathfrak{J}_{KL}(\mathbf{X})$ i przestrzenny $j^{kl}(\mathbf{x}, t)$, symetryczne i dodatnio zdefiniowane [46], dane są następującymi wzorami:

$$\mathfrak{J}^{KL} = j^{kl} \chi_k^K \chi_l^L, \quad j_{kl} = \mathfrak{J}_{KL} \chi_k^K \chi_l^L. \quad (5.4)$$

Wzory (5.3) i (5.4) wyrażają odpowiednio lokalne prawa zachowania masy i mikrobezładności.

Temperatura ciała w konfiguracji odniesienia w chwili $t = t_0$ wynosi $T_0(\mathbf{X})$. Może się ona zmieniać w czasie i w konfiguracji aktualnej zależy zarówno od czasu jak i od położenia, t.zn. $T = T(\mathbf{x}, t)$. W dalszych rozważaniach korzystając będziemy z nowej wielkości, którą oznaczamy Θ i definiujemy jako funkcję pierwotną temperatury

$$\dot{\Theta}(\mathbf{x}, t) = T(\mathbf{x}, t). \quad (5.5)$$

¹ Współrzędne Eulera czasami nazywa się współrzędnymi obserwatora, podczas gdy współrzędne Lagrange'a są nazywane współrzędnymi konwekcyjnymi.

Jeżeli T jest całkowalną funkcją czasu t , wtedy możemy napisać, że

$$\Theta(\mathbf{x}, t) = \Theta_0 + \int_{t_0}^t T(\mathbf{x}, \tau) d\tau. \quad (5.6)$$

Na ciało działa zewnętrzne pole elektryczne $\mathbf{E} = \mathbf{E}(\mathbf{x}, t)$ i pole indukcji magnetycznej $\mathbf{B} = \mathbf{B}(\mathbf{x}, t)$. Jeśli możemy wyrazić pola \mathbf{E} i \mathbf{B} przez potencjał wektorowy $\mathbf{A}(\mathbf{x}, t)$ i przez potencjał skalarny $\varphi(\mathbf{x}, t)$

$$E_l = -\frac{\partial A_l}{\partial t} + \varphi_{,l}, \quad B^k = \varepsilon^{kmn} A_{n,m}, \quad (5.7)$$

to w tej reprezentacji dwa równania Maxwella, prawo Faradaya

$$\nabla \times \mathcal{E} + \dot{\mathbf{B}} = \mathbf{0}, \quad (5.8)$$

i prawo zachowania strumienia magnetycznego (magnetyczne prawo Gaussa)

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (5.9)$$

są spełnione tożsamościowo (patrz np. [59], [60]). Wielkość \mathcal{E} definiujemy jako wektor natężenia pola elektrycznego we współrzędnych poruszających się wraz z cząsteczką

$$\mathcal{E} = \mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}. \quad (5.10)$$

Pochodna konwekcyjna, oznaczana przez gwiazdkę umieszczoną nad odpowiednią wielkością, jest zdefiniowana następująco:

$$\dot{F}^k \equiv \frac{D^* F^k}{Dt} \equiv \dot{F}^k + F^k v^l_{,l} - F^l v^k_{,l}. \quad (5.11)$$

Kropka nad symbolem oznacza materialną pochodną czasową

$$\dot{F} \equiv \frac{DF}{Dt} \equiv \frac{\partial F}{\partial t} + v^k \frac{\partial F}{\partial x^k}, \quad (5.12)$$

a $v^k = v^k(x^l, t)$ – prędkość ruchu postępowego

$$v^k(x^l, t) \equiv \frac{\partial x^k}{\partial t}. \quad (5.13)$$

W ośrodku elektromagnetycznym, z każdym punktem materialnym o współrzędnych (\mathbf{x}, t) , związany jest swobodny ładunek elektryczny q_f i wektor prądu elektrycznego \mathbf{J} . W naszym podejściu wariacyjnym zakładamy spełnienie wewnątrz ciała prawa zachowania ładunku elektrycznego [47], [48], [60] w postaci

$$\frac{\partial q_f}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0. \quad (5.14)$$

Na brzegu (o wektorze normalnym \mathbf{n} skierowanym na zewnątrz), zakładamy spełnienie następującego warunku:

$$\mathcal{J} \cdot \mathbf{n} = 0, \quad (5.15)$$

gdzie \mathcal{J} jest wektorem prądu elektrycznego w poruszającym się układzie współrzędnych

$$\mathcal{J} \equiv \mathbf{J} - q_f \mathbf{v}. \quad (5.16)$$

Wprowadźmy teraz inny wektor niezmienniczy względem cechowania i funkcję skalarnego potencjału ζ , ϕ , Ψ (porównaj Dodatek E)

$$\begin{aligned} \phi &\equiv \varphi + \mathbf{v} \cdot \mathbf{A} = \dot{\Psi}, \\ \zeta &\equiv -\mathbf{A} + \nabla \Psi. \end{aligned} \quad (5.17)$$

Pola elektromagnetyczne można teraz wyrazić następująco:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_k &= -(\dot{A}_k + v^m{}_{,k} A_m) + \phi_{,k} = \dot{\zeta}_k + v^m{}_{,k} \zeta_m, \\ \mathbf{B} &= -\nabla \times \zeta. \end{aligned} \quad (5.18)$$

Pola \mathcal{E} i \mathbf{B} spełniają bezźródłowe równania Maxwella (5.8) i (5.9) tożsamościowo. Ze wzoru $\dot{X}^K = 0$ wynika, że prędkość v^k (5.13) jest dana również następującym równaniem:

$$v^k = -x^k{}_{,L} \frac{\partial X^L}{\partial t}. \quad (5.19)$$

Direktor obraca się z prędkością kątową $\boldsymbol{\omega}$ zdefiniowaną równaniem (4.39). Będziemy posługiwać się również tensorem ruchu obrotowego (gyration tensor) ${}_d\omega^{kl}$

$${}_d\omega^k{}_l = \dot{\chi}^k{}_K \chi_l^K, \quad {}_d\omega^{kl} = -{}_d\omega^{lk}. \quad (5.20)$$

Jego związek z prędkością kątową jest oczywisty:

$$\omega^k = -\frac{1}{2}\varepsilon^{klm} \omega_{lm}, \quad \omega_{kl} = -\varepsilon^{klm} \omega_m. \quad (5.21)$$

Wektor gęstości spinu σ definiowany jest jako iloczyn tensora mikrobezładności i prędkości kątowej

$$\sigma^k = j^{kl} \omega_l. \quad (5.22)$$

W celu zdefiniowania energii ciała mikropolarnego potrzebne będą [46]:

— tensory deformacji Cosserat \mathfrak{C}_{KL} i \mathfrak{c}_{kl}

$$\mathfrak{C}_{KL} \equiv x^k{}_{,K} \chi_{kL}, \quad \mathfrak{c}_{kl} \equiv X^K{}_{,k} \chi_l^L \delta_{LK}, \quad (5.23)$$

— oraz tensory giętno-skrętne (wryness tensors) Γ_{KL} i γ_{kl}

$$\Gamma_{KL} \equiv \frac{1}{2}\varepsilon_{KMN} \chi^{kM}{}_{,L} \chi_k^N, \quad \gamma_{lk} \equiv \frac{1}{2}\varepsilon_{lmn} \chi^{mK} \chi^n{}_{K,k}. \quad (5.24)$$

Łatwo widać, że

$$\gamma_{lk} = X^K{}_{,k} \chi_l^L \Gamma_{LK}. \quad (5.25)$$

Zauważmy ponadto, że [46]

$$\dot{\mathfrak{C}}_{KL} = a_{kl} x^k{}_{,K} \chi_l^L, \quad \dot{\Gamma}_{LK} = b_{lk} x^k{}_{,K} \chi_l^L, \quad (5.26)$$

gdzie \mathbf{a} i \mathbf{b} są tensorami prędkości deformacji

$$a_{kl} \equiv v_{l,k} + \omega_{kl}, \quad b_{kl} \equiv \omega_{k,l}. \quad (5.27)$$

5.3. Zasada wariacyjna dla ośrodka mikropolarnego oddziałującego z polem elektromagnetycznym i z polem temperatury

Wariacja jest bardzo użytecznym matematycznym pojęciem, pozwalającym na zbadanie infinitezimalnego sąsiedztwa dowolnej wielkości. W przeciwieństwie do procesu różniczkowania w zwykłym rachunku różniczkowym, infinitezymalne różnice nie są wywołane przez zachodzącą zmianę zmiennych niezależnych, lecz są nakładane przez nas na zbiór zmiennych

jako rodzaj matematycznego doświadczenia [87], podczas którego rozpatruje się zmiany wirtualne. Lagrange wprowadził specjalny symbol δ , aby odróżnić wariację od różniczkowania d . Obie operacje, wariowanie i różniczkowanie, są często używane równocześnie, jest więc bardzo ważne by je umieć odróżniać od siebie.

Przytoczymy teraz kilka pożytecznych definicji (porównaj [59], [60]).

Definicja 5.1.

Transformację \bar{x}^α współrzędnych x^α , $\alpha = 1, 2, 3, 4$, definiują następujące związki

$$\bar{x}^\alpha = x^\alpha + \varepsilon \delta_\varepsilon x^\alpha \in \mathbb{K}(x^\alpha; \varepsilon) \subset \mathbb{R}^4, \quad (5.28)$$

gdzie ε jest dodatnim parametrem, $\varepsilon \delta_\varepsilon x^\alpha$ jest przyrostem x^α i $\mathbb{K}(x^\alpha; \varepsilon)$ jest wnętrzem sfery w czteroprzestrzeni ze środkiem umieszczonym w x^α i o promieniu ε .

Definicja 5.2.

Punkty \bar{x}^α i x^α nazywamy *punktami bliskimi* w \mathbb{R}^4 , jeśli spełnione są związki (5.28).

Definicja 5.3.

Wariację δx^α współrzędnych x^α definiujemy jako granicę

$$\delta x^\alpha = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \delta_\varepsilon x^\alpha, \quad (5.29)$$

jeśli ta granica istnieje.

Zauważmy, że równanie (5.28) może być rozumiane jako jednoparametrowa rodzina przyrostów $\delta_\varepsilon x^\alpha$ i że dla $\varepsilon = 0$ jest ona zbieżna z definicją wariacji δx^α , czyli

$$\delta x^\alpha = \delta_\varepsilon x^\alpha |_{\varepsilon=0} .$$

Z drugiej strony Definicja 5.3 jest równoważna definicji wariacji używanej zazwyczaj w teoriach sprężystości [29], [59], [141],

$$\delta x^\alpha = \frac{d}{d\varepsilon} \bar{x}^\alpha(x^\beta, \varepsilon) \Big|_{\varepsilon=0} .$$

Definicja 5.4.

Niech $A \subset \mathbb{R}^4$, $B \subset \mathbb{R}$, $\bar{B} \subset \mathbb{R}$, i niech $f, \bar{f} \in \mathcal{C}_1(\mathbb{R}^4)$ będą następującymi funkcjami

$$f : A \longrightarrow B, \quad \bar{f} : A \longrightarrow \bar{B}. \quad (5.30)$$

Funkcje f i \bar{f} są nazywane *funkcjami bliskimi*, jeśli dla każdego $\varepsilon > 0$ istnieje taka różniczkowalna funkcja $f_\varepsilon : A \longrightarrow \bar{B}$, $f_\varepsilon \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R}^4)$, że

$$\bar{f}(x^\alpha) = f(x^\alpha) + \varepsilon f_\varepsilon(x^\alpha), \quad (5.31)$$

i $\bar{f}(x^\alpha) \in \mathbb{K}(f(x^\alpha); \varepsilon) \subset \mathbb{R}$.

Definicja 5.5.

Niech f i \bar{f} będą funkcjami bliskimi. Jeżeli granica

$$\partial f(x^\alpha) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} f_\varepsilon(x^\alpha), \quad (5.32)$$

istnieje, to funkcja $\partial f(x^\alpha)$ jest nazywana *cząstkową wariacją* funkcji f .

Definicja 5.6.

Granice

$$\delta f(x^\alpha) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \delta_\varepsilon f(x^\alpha), \quad (5.33)$$

nazywamy *pełną wariacją* funkcji f , jeśli ta granica istnieje i gdzie

$$\delta_\varepsilon f(x^\alpha) \equiv \frac{\bar{f}(\bar{x}^\alpha) - f(x^\alpha)}{\varepsilon}. \quad (5.34)$$

Łatwo można zauważyć, że

$$\delta f(x^\alpha) = \partial f(x^\alpha) + f_{,\beta}(x^\alpha) \delta x^\beta(x^\alpha), \quad (5.35)$$

ponieważ zgodnie z Definicją 5.5 i z Definicją 5.6 mamy, iż

$$\begin{aligned} \delta f(x^\alpha) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{[\bar{f}(\bar{x}^\alpha) - \bar{f}(x^\alpha)] + [\bar{f}(x^\alpha) - f(x^\alpha)]}{\varepsilon} \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} f_\varepsilon(x^\alpha) + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\bar{f}(\bar{x}^\alpha) - \bar{f}(x^\alpha)}{\varepsilon} \\ &= \partial f(x^\alpha) + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{f(\bar{x}^\alpha) - f(x^\alpha)}{\bar{x}^\beta - x^\beta} \delta_\varepsilon x^\beta, \end{aligned}$$

skąd już równanie (5.35) wynika.

Niech F będzie funkcjonałem $F : A \times B \rightarrow \mathbb{R}$ postaci

$$F = F(x^\alpha, f^i(x^\alpha)), \quad i = 1, \dots, n, \quad (5.36)$$

zdefiniowanym w każdym punkcie $x^\alpha \in A \subset \mathbb{R}^4$ i niech dla każdej takiej funkcji $f^i \in \mathcal{C}^1(A)$, że

$$f^i : A \rightarrow B \subset \underbrace{\mathbb{R} \times \dots \times \mathbb{R}}_{n_i}. \quad (5.37)$$

Twierdzenie 5.1.

Jeśli funkcjonał $F \in \mathcal{C}^1(A \times B)$ i

$$f(x^\alpha) = F(x^\alpha, f^i(x^\alpha)), \quad (5.38)$$

$$\bar{f}(x^\alpha) = F(x^\alpha, \bar{f}^i(x^\alpha)),$$

wtedy f i \bar{f} są funkcjami bliskimi i

$$\delta f = F_{,\alpha} \delta x^\alpha + \frac{\partial F}{\partial f^i} \delta f^i, \quad (5.39)$$

$$\partial f = \frac{\partial F}{\partial f^i} \partial f^i.$$

Rezultat wynika bezpośrednio z twierdzenia o wartości średniej.

Współrzędne materialne X^K , $K = 1, 2, 3$, numerują punkty materialne w ciele materialnym \mathcal{B}_0 i nie ulegają zmianie podczas dowolnego procesu deformacyjnego, ponieważ są związane z danym punktem materialnym raz i na zawsze. Oznacza to, że

$$\delta X^K = 0, \quad (5.40)$$

i

$$\bar{X}^K(x^\alpha) = X^K(x^\alpha) + \varepsilon X_\varepsilon^K(x^\alpha), \quad (5.41)$$

gdzie X_ε^K należy rozumieć w sensie Definicji 5.4. Z równania (5.35) wynika, że wariacja cząstkowa X^K jest postaci

$$\partial X^K = -X^{K, \beta} \delta x^\beta. \quad (5.42)$$

Wyrażenie $X^K = X^K(x^k, t)$ oznacza, że w konfiguracji bieżącej ciała \mathcal{B} w punkcie przestrzeni fizycznej o współrzędnych x^k i w chwili t znajduje się punkt materialny o numerze X^K . Z (5.40) i (A.8) wynika, że

$$\delta(X^K,_{\alpha}) = -X^K,_{\beta}(\delta x^{\beta}),_{\alpha} . \quad (5.43)$$

Mamy więc

$$\delta[\det(X^K,_{,l})] = -[(\delta x^k),_{,k} - v^k(\delta t),_{,k}] \det(X^K,_{,l}) , \quad (5.44)$$

a z równania (5.19)

$$\delta v^k = \frac{D}{Dt}(\delta x^k) - v^k \frac{D}{Dt}(\delta t) . \quad (5.45)$$

W naszych obliczeniach wykorzystujemy często następujące wzory

$$\begin{aligned} \delta \Xi^K(\mathbf{X}) &= 0 , \\ \delta \rho_0(\mathbf{X}) &= 0 , \\ \delta \mathfrak{J}^{KL}(\mathbf{X}) &= 0 , \end{aligned} \quad (5.46)$$

wynikające z założenia (5.40) i z Twierdzenia 5.1.

Wprowadzimy teraz wariację kątową $\delta \kappa^k$ i lokalną wariację kątową $\check{\delta} \kappa^k$ poprzez następujące definicje:

$$\begin{aligned} \delta \boldsymbol{\xi} &= \delta \boldsymbol{\kappa} \times \boldsymbol{\xi} , \\ \check{\delta} \boldsymbol{\xi} &= \check{\delta} \boldsymbol{\kappa} \times \boldsymbol{\xi} , \end{aligned} \quad (5.47)$$

gdzie $\delta \boldsymbol{\xi}$ jest odpowiednio wariacją, a $\check{\delta} \boldsymbol{\xi}$ jest lokalną wariacją direktora $\boldsymbol{\xi}$, a

$$\delta \boldsymbol{\xi} = \check{\delta} \boldsymbol{\xi} + \dot{\boldsymbol{\xi}} \delta t . \quad (5.48)$$

Z równania mikroruchu (4.32) wynika, że

$$\delta \xi^k = \xi^l \delta_{,d} \kappa_l^k , \quad (5.49)$$

gdzie $\delta_{,d} \kappa_l^k$ jest wariacją skośnie symetrycznego tensora, dualną do wariacji $\delta \kappa^l$ i zdefiniowanej jako

$$\delta_{,d} \kappa_l^k \equiv \chi_l^K \delta \chi^K_K . \quad (5.50)$$

Okazuje się, że wariacja kątowna $\delta\kappa^k$ i lokalna wariacja kątowna $\check{\delta}\kappa^k$ mogą być zapisane w postaci podanej przez poniższe wyrażenia:

$$\delta\kappa^k = \frac{1}{2}\varepsilon^{kmn}\delta_{,d}\kappa_{mn}, \quad (5.51)$$

$$\check{\delta}\kappa^k = \delta\kappa^k - \omega^k \delta t, \quad (5.52)$$

gdzie $\boldsymbol{\omega}$ jest wektorem prędkości kątownej zdefiniowanej poprzez równanie (4.39).

Wariację lokalną $\check{\delta}x^k$ definiujemy następująco

$$\check{\delta}x^k \equiv \delta x^k - v^k \delta t. \quad (5.53)$$

Związek lokalnej wariacji $\check{\delta}\mathbf{x}$ ze zdeformowanym obrazem wariacji cząstkowej $\partial\mathbf{X}$ daje równanie

$$\check{\delta}x^k = -x^k_{,K} \partial X^K. \quad (5.54)$$

W naszym podejściu naśladujemy Grota [59], [60], który do opisu pola elektromagnetycznego użył niezmiennicze względem cechowania wariacje Weissa [152] potencjałów pola elektromagnetycznego

$$\begin{aligned} \hat{\delta}A_k &\equiv \delta A_k - A_{l,k} \delta x^l - \varphi_{,k} \delta t, \\ \hat{\delta}\varphi &\equiv \delta\varphi - \frac{\partial A_k}{\partial t} \delta x^k - \frac{\partial\varphi}{\partial t} \delta t. \end{aligned} \quad (5.55)$$

Będziemy używać również innej wariacji niezmienniczej względem cechowania

$$\hat{\delta}\phi \equiv \hat{\delta}\varphi + v^k \hat{\delta}A_k, \quad (5.56)$$

gdzie φ i \mathbf{A} jest odpowiednio skalarnym i wektorowym potencjałem pola elektromagnetycznego (patrz równania (5.7)). Wariacje innych potencjałów niezmienniczych względem cechowania zdefiniowanych przez równanie (5.17) są następujące:

$$\hat{\delta}\phi = \frac{D}{Dt}(\delta\Psi - \mathbf{A} \cdot \check{\delta}\mathbf{x} - \phi \delta t), \quad (5.57)$$

$$\delta\zeta_k = -\hat{\delta}A_k + (\delta\Psi - \mathbf{A} \cdot \check{\delta}\mathbf{x} - \phi \delta t)_{,k} - \zeta_l[(\check{\delta}x^l)_{,k} + v^l_{,k} \delta t].$$

Powyżej zaproponowaliśmy cztery definicje wariacji: wariację całkowitą δ , wariację cząstkową ∂ , wariację typu Weissa $\hat{\delta}$ i wariację lokalną $\check{\delta}$. Inne ważne i potrzebne wzory umieściliśmy w Dodatku na stronie 199.

Funkcjonał działania Lagrange'a I we współrzędnych Eulera [60] zapisujemy następująco:

$$I = \int_{t_1}^{t_2} \int_{\mathcal{V}} \rho [\mathbf{K}e(\mathbf{x}, t) - \psi(\mathbf{x}, t)] dv dt + \int_{t_1}^{t_2} \int_V \mathbf{M}e dv dt. \quad (5.58)$$

Wynika stąd, że w opisie Lagrange'a przyjmuje on postać

$$I = \int_{t_1}^{t_2} \int_{\mathcal{V}_0} \rho_0 [\mathbf{K}e(\mathbf{X}, t) - \psi(\mathbf{X}, t)] dv_0 dt + \int_{t_1}^{t_2} \int_V \mathbf{M}e dv dt. \quad (5.59)$$

Przez $\mathcal{V} = \mathcal{V}(t)$ oznaczamy objętość zajmowaną przez ciało materialne \mathcal{B} w chwili $t \in \langle t_1; t_2 \rangle$, $\mathcal{V}_0 = \mathcal{V}(t_0)$, V oznacza całą przestrzeń, $\rho_{\mathbf{K}}e(\mathbf{x}, t)$ energię kinetyczną ośrodka mikropolarnego

$$\mathbf{K}e = \frac{1}{2}(\mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\sigma}), \quad (5.60)$$

ψ uogólnioną energię swobodną Helmholtza ciekłego kryształu, $\mathbf{M}e$ gęstość Lagrange'a pola elektromagnetycznego

$$\mathbf{M}e = \frac{1}{2}(\varepsilon_0 \mathbf{E} \cdot \mathbf{E} - \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B} \cdot \mathbf{B}), \quad (5.61)$$

a ε_0 i μ_0 odpowiednio elektryczną przenikalność próżni i magnetyczną podatność próżni.

Ze względu na występowanie pól elektromagnetycznych, energia swobodna Helmholtza [124] jest tu zastąpiona przez uogólnioną energię swobodną Helmholtza ψ [44], [47], [48], która jest definiowana jako

$$\psi = \epsilon - T\eta - \frac{1}{\rho} \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (5.62)$$

gdzie ϵ jest gęstością energii wewnętrznej. Funkcjonał $\psi(\mathbf{x}, t)$ zależy od zmiennych konstytutywnych. Zależność ta jest różna dla różnych typów materiałów [46], na przykład

— dla ciekłych kryształów:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \psi(\rho^{-1}, \mathbf{j}, \boldsymbol{\gamma}^T, T, \boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{B}), \quad (5.63)$$

— dla prostych ciał stałych:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \psi(\rho, \mathbf{j}, \mathbf{c}, \boldsymbol{\gamma}^T, T, \boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{B}), \quad (5.64)$$

— dla prostych cieczy:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \psi(\rho^{-1}, \mathbf{j}, T, \boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{B}), \quad (5.65)$$

i jest ograniczona poprzez aksjomat obiektywności (funkcjonał ψ zachowuje niezmienniczą postać przy zależnych od czasu sztywnych ruchach przestrzennego układu odniesienia). Zgodnie z ideą Nolla o grupie izotropii [112], zależność ψ od niezależnych zmiennych konstytutywnych ciekłego kryształu w opisie Lagrange'owskim jest następująca [120]:

$$\psi(\mathbf{X}, t) = \psi(\rho_0^{-1}, \mathfrak{J}, \mathbf{c}, \boldsymbol{\Gamma}^T, T, \boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{B}). \quad (5.66)$$

Entropia η dana jest wzorem

$$\eta = -\frac{\partial \psi}{\partial T}, \quad (5.67)$$

a polaryzacja \mathbf{P} i magnetyzacja \mathcal{M} wyrażają się następująco:

$$\begin{aligned} P^k &= -\rho \frac{\partial \psi}{\partial \mathcal{E}_k}, \\ \mathcal{M}_m &= -\rho \frac{\partial \psi}{\partial B^m}. \end{aligned} \quad (5.68)$$

Wprowadzamy oznaczenia [46]:

$$\begin{aligned} \mathbf{t} &= {}_{\mathbf{E}}\mathbf{t} + {}_{\mathbf{D}}\mathbf{t}^T, \\ \mathbf{m} &= {}_{\mathbf{E}}\mathbf{m} + {}_{\mathbf{D}}\mathbf{m}, \end{aligned} \quad (5.69)$$

gdzie \mathbf{t} – tensor naprężenia, \mathbf{m} – tensor naprężeń momentowych, ${}_{\mathbf{E}}\mathbf{t}$ i ${}_{\mathbf{E}}\mathbf{m}$ – równowagowe składowe odpowiednio tensorów naprężenia i naprężeń momentowych, a ponadto

$$\begin{aligned} {}_{\mathbf{E}}t^k{}_l &\equiv -\pi \delta_l^k - {}_{\mathbf{E}}m^{kr} \gamma_{rl}, \\ {}_{\mathbf{E}}m^{kl} &\equiv \rho \frac{\partial \psi}{\partial \gamma_{lk}}, \\ \pi &\equiv -\frac{\partial \psi}{\partial \rho^{-1}}. \end{aligned} \quad (5.70)$$

Tutaj π – ciśnienie termodynamiczne. Powyższe równania są dobrze znanymi równowagowymi równaniami konstytutywnymi ciekłych kryształów [44].

Aby można było zapisać wariację działania Lagrange'a I (5.58) we względnie zwartej postaci, wprowadzamy następujące oznaczenia

$$\delta I = \delta I_{\mathcal{V}} + \delta I_{\partial \mathcal{V}} + \delta I_{V-\mathcal{V}}, \quad (5.71)$$

gdzie

$$\begin{aligned} \delta I_{\mathcal{V}} = \int_{t_1}^{t_2} \int_{\mathcal{V}} \left\{ & \left(-\rho \dot{v}_l + {}_{\mathbf{E}}t^k{}_{l,k} + {}_{\mathbf{M}}f_l \right) \check{\delta} x^l \right. \\ & + \left(-\rho \dot{\sigma}_l + {}_{\mathbf{E}}m^k{}_{l,k} + \varepsilon_{lmn} {}_{\mathbf{E}}t^{mn} + {}_{\mathbf{M}}l_l \right) \check{\delta} \kappa^l \\ & - \rho \dot{\eta} \delta \Theta + \left(\overset{*}{D}^l - \varepsilon^{lkm} \mathcal{H}_{m,k} \right) \hat{\delta} A_l - D^k{}_{,k} \hat{\delta} \phi \\ & \left. + \left(\rho \dot{e} - {}_{\mathbf{E}}t^{kl} a_{kl} - {}_{\mathbf{E}}m^{kl} b_{lk} - q^k{}_{,k} - {}_{\mathbf{M}}h \right) \delta t \right\} dv dt, \end{aligned} \quad (5.72)$$

$$\begin{aligned} \delta I_{\partial \mathcal{V}} = - \int_{t_1}^{t_2} \int_{\partial \mathcal{V}} \left\{ & \left({}_{\mathbf{E}}t^k{}_l + [{}_{\mathbf{M}}t^k{}_l + G_l v^k] \right) \delta x^l \right. \\ & + {}_{\mathbf{E}}m^k{}_l \check{\delta} \kappa^l + \varepsilon^{klm} [{}_{\mathcal{H}}_m] \hat{\delta} A_l - [D^k] \hat{\delta} \phi \\ & \left. - \left[({}_{\mathbf{E}}t^k{}_l + {}_{\mathbf{M}}t^k{}_l + G_l v^k) v^l - [{}_{\mathcal{S}}^k] \right] \delta t \right\} n_k ds dt, \end{aligned} \quad (5.73)$$

$$\delta I_{V-\mathcal{V}} = \int_{t_1}^{t_2} \int_{V-\mathcal{V}} \left\{ \left({}_{\mathbf{M}}t^k{}_{l,k} - G_{l,t} \right) \delta x^l + \left(D^l{}_{,t} - \varepsilon^{lkm} H_{m,k} \right) \left(\hat{\delta} A_l + E_l \delta t \right) - D^k{}_{,k} \hat{\delta} \varphi \right\} dv dt, \quad (5.74)$$

Przy wyprowadzaniu wzorów (5.72) – (5.74) zastosowaliśmy wyrażenia na wariacje całek, wariacje zmiennych konstytutywnych i na wariacje funkcjonałów podane w Dodatku. Wykorzystaliśmy również równania konstytutywne (5.67) – (5.70). Założyliśmy, że dla $t = t_1$ i $t = t_2$ wszystkie wariacje znikają. Użyliśmy następnie twierdzenie Greena – Gaussa – Ostrogradskiego. Ponadto, zastosowaliśmy znane wzory

$$\begin{aligned} \mathbf{P} &= \mathbf{D} - \varepsilon_0 \mathbf{E}, \\ \mathbf{M} &= \mathbf{M} + \mathbf{v} \times \mathbf{P}, \\ \mathbf{M} &= \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B} - \mathbf{H}, \end{aligned} \quad (5.75)$$

gdzie \mathbf{D} – wektor przemieszczenia dielektrycznego, a \mathbf{H} – wektor pola magnetycznego.

Zauważmy, że niektóre wielkości mają różne wartości wewnątrz i na zewnątrz ciała:

— natężenie pola magnetycznego

$$\mathfrak{H} = \mathbf{H} - \mathbf{v} \times \mathbf{D} \text{ w } \mathcal{V}, \text{ i } \mathfrak{H} = \mathbf{H} \text{ w } V - \mathcal{V}, \quad (5.76)$$

— wektor przemieszczenia dielektrycznego

$$\mathbf{D} = \mathbf{P} + \varepsilon_0 \mathbf{E} \text{ w } \mathcal{V}, \text{ i } \mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} \text{ w } V - \mathcal{V}, \quad (5.77)$$

— wektor Poyntinga

$$\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathfrak{H} \text{ w } \mathcal{V}, \text{ i } \mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H} \text{ w } V - \mathcal{V}, \quad (5.78)$$

— tensor naprężenia Maxwella

$$\begin{aligned}
{}_M t^k_l &= P^k \mathcal{E}_l - B^k \mathcal{M}_l + \varepsilon_0 E^k E_l + \frac{1}{\mu_0} B^k B_l \\
&\quad - \frac{1}{2} \left(\varepsilon_0 \mathbf{E} \cdot \mathbf{E} + \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B} \cdot \mathbf{B} - 2 \mathcal{M} \cdot \mathbf{B} \right) \delta_l^k, \quad \text{w } \mathcal{V}, \\
{}_M t^k_l &= \varepsilon_0 E^k E_l + \frac{1}{\mu_0} B^k B_l \\
&\quad - \frac{1}{2} \left(\varepsilon_0 \mathbf{E} \cdot \mathbf{E} + \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B} \cdot \mathbf{B} \right) \delta_l^k, \quad \text{w } V - \mathcal{V},
\end{aligned} \tag{5.79}$$

ale elektromagnetyczny wektor pędu ma taką samą postać w całej przestrzeni

$$\mathbf{G} = \varepsilon_0 \mathbf{E} \times \mathbf{B} \quad \text{w } V. \tag{5.80}$$

Wewnątrz ciała wielkości elektromagnetyczne: siła, moment i energia dane są następująco [44]:

$$\begin{aligned}
{}_M f^l &= {}_M t^{kl}{}_{,k} - G^l{}_{,t}, \\
{}_M l^k &= \varepsilon^{klm} {}_M t_{lm}, \\
{}_M h &= \rho \mathcal{E}_k \frac{D}{Dt} (\rho^{-1} P^k) - \mathcal{M}_k \dot{B}^k + \mathcal{J}^k \mathcal{E}_k - {}_M l_k \omega^k.
\end{aligned} \tag{5.81}$$

Postulujemy następującą zasadę wariacyjną dla ciała mikropolarnego oddziałującego z polem mechanicznym elektromagnetycznym i termicznym:

$$\delta I = {}_D \mathcal{U} - {}_S \mathcal{W}, \tag{5.82}$$

gdzie

$${}_D \mathcal{U} \equiv \int_{t_1}^{t_2} {}_D U dt, \quad {}_S \mathcal{W} \equiv \int_{t_1}^{t_2} {}_S W dt. \tag{5.83}$$

Postulowana zasada wariacyjna (5.82) uwzględnia nieodwracalność procesów termo – elektromechanicznych procesów w ośrodku mikropolarnym. Pojęcie nieodwracalności jest ściśle związane ze zjawiskiem dodatniej produkcji entropii i z dyssypacją energii. W ciekłych kryształach energia może

być dyssypowana w wyniku tarcia pojawiającego w trakcie lepkiego przepływu oraz w rezultacie przewodnictwa ciepła i przepływu prądu elektrycznego.

We wzorze (5.83) ${}_D U$ oznacza energię zdyssypowaną w procesie wariacyjnym. W przypadku ciekłych kryształów ${}_D U$ jest dana jako

$$\begin{aligned} {}_D U = \int_V \left\{ {}_D t_l^k \left[(\check{\delta} x^l)_{,k} - \varepsilon^l{}_{nk} \check{\delta} \kappa^n + a_k^l \delta t \right] \right. \\ \left. + {}_D m^k{}_l \left[(\check{\delta} \kappa^l)_{,k} + b^l{}_k \delta t \right] + \frac{1}{T} q^k \left[(\delta \Theta)_{,k} - T(\delta t)_{,k} \right] \right. \\ \left. - \rho \gamma \delta \Theta - \mathcal{J}^k \hat{\delta} A_k - q_f \hat{\delta} \phi \right\} dv, \end{aligned} \quad (5.84)$$

Tutaj \mathbf{q} jest wektorem ciepła i γ jest gęstością produkcji entropii [47], [48] spełniającą prawo nierówności entropii:

$$\rho \gamma \geq 0. \quad (5.85)$$

Praca wirtualna ${}_S W$ w (5.83) dla ciekłych kryształów dana jest jako

$$\begin{aligned} {}_S W = \int_V \rho \left\{ \tilde{\mathbf{f}} \cdot \check{\delta} \mathbf{x} + \tilde{\mathbf{l}} \cdot \check{\delta} \boldsymbol{\kappa} + \frac{\tilde{h}}{T} (\delta \Theta - T \delta t) \right\} dv \\ + \int_{\partial V} \left\{ \tilde{\mathbf{t}}_{(n)} \cdot \check{\delta} \mathbf{x} + \tilde{\mathbf{m}}_{(n)} \cdot \check{\delta} \boldsymbol{\kappa} + \tilde{s}_{(n)} \delta \Theta \right. \\ \left. + 1/T \tilde{q}_{(n)} (\delta \Theta - T \delta t) - \tilde{\mathcal{K}} \cdot \hat{\delta} \mathbf{A} - \tilde{\omega}_f \hat{\delta} \phi \right\} ds, \end{aligned} \quad (5.86)$$

gdzie $\tilde{\mathbf{f}}$ – gęstość przyłożonych sił objętościowych, $\tilde{\mathbf{l}}$ – gęstość przyłożonych momentów objętościowych, \tilde{h} – gęstość przyłożonych źródeł ciepła na jednostkę masy, $\tilde{\mathbf{t}}_{(n)}$ – przyłożone napięcie powierzchniowe, $\tilde{\mathbf{m}}_{(n)}$ – moment sił powierzchniowych, $\tilde{q}_{(n)}$ – strumień ciepła, $\tilde{s}_{(n)} + \tilde{q}_{(n)}/T$ – strumień entropii na jednostkę powierzchni, $\tilde{\omega}_f$ – rozkład swobodnego elektrycznego ładunku powierzchniowego i $\tilde{\mathcal{K}}$ – gęstość elektrycznego prądu powierzchniowego styczna do ∂V .

Zgodnie z nierównością entropijną wybieramy

$$\tilde{s}_{(n)} \equiv \tilde{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{n} \geq 0, \quad (5.87)$$

gdzie \mathbf{n} jest jednostkowym wektorem normalnym do powierzchni $\partial\mathcal{V}$. Równania lokalne możemy wyprowadzić podstawiając (5.71), (5.84) i (5.86) do (5.82) i zakładając, że nasza zasada wariacyjna (5.82) jest poprawna w dowolnej objętości \mathcal{V} zajmowanej przez ciało. Otrzymana w ten sposób zasada lokalna jest liniowa dla dowolnych wariacji: $\delta\mathbf{x}$, $\delta\boldsymbol{\kappa}$, δt , $\delta\Theta$, $\delta\hat{\phi}$ i $\delta\hat{\mathbf{A}}$. Aby spełnić zasadę (5.82) współczynniki tych wariacji muszą zniknąć, co w wyniku doprowadza do odpowiednich lokalnych praw zachowania.

Ostatecznie otrzymujemy:

A. wewnątrz ciała

— prawo zachowania pędu (porównaj (4.57))

$$-\rho \dot{v}_l + t^k{}_{l,k} + {}_{\mathbf{M}}f_l + \rho \tilde{f}_l = 0, \quad (5.88)$$

— prawo zachowania momentu pędu (porównaj (4.58))

$$-\rho \dot{\sigma}_l + m^k{}_{l,k} + \varepsilon_{lmn} t^{mn} + {}_{\mathbf{M}}l_l + \rho \tilde{l}_l = 0, \quad (5.89)$$

— prawo zachowania energii

$$\rho \dot{e} - t^{kl} a_{kl} - m^{kl} b_{lk} - q^k{}_{,k} - {}_{\mathbf{M}}h - \rho \tilde{h} = 0, \quad (5.90)$$

— prawo elektryczne Gaussa (porównaj (4.61))

$$q_f - D^k{}_{,k} = 0, \quad (5.91)$$

— prawo Ampere'a (porównaj (4.62))

$${}^*D^l - \varepsilon^{lkm} \mathcal{H}_{m,k} + \mathcal{J}^l = 0, \quad (5.92)$$

— prawo produkcji entropii

$$\rho \gamma = \rho \dot{\eta} - \nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{q}}{T} \right) - \frac{\rho \tilde{h}}{T}, \quad (5.93)$$

B. na zewnątrz ciała

— prawo zachowania pędu elektromagnetycznego

$${}_{\mathbf{M}}t^k{}_{l,k} - G_{l,t} = 0, \quad (5.94)$$

— elektryczne prawo Gaussa

$$D^k{}_{,k} = 0, \quad (5.95)$$

— prawo Ampere'a

$$D^l{}_{,t} - \varepsilon^{lkm} H_{m,k} = 0, \quad (5.96)$$

— prawo zachowania energii

$$\left(D^l{}_{,t} - \varepsilon^{lkm} H_{m,k} \right) E_l = 0, \quad (5.97)$$

C. warunki brzegowe na $\partial\mathcal{V}$:

$$\llbracket t^k{}_l + {}_M t^k{}_l + G_l v^k \rrbracket n_k = 0, \quad (5.98)$$

$$\llbracket m^k{}_l \rrbracket n_k = 0, \quad (5.99)$$

$$\llbracket (t^k{}_l + {}_M t^k{}_l + G_l v^k) v^l + q^k - \mathcal{S}^k \rrbracket n_k = 0, \quad (5.100)$$

$$\omega_f - \llbracket D^k \rrbracket n_k = 0, \quad (5.101)$$

$$\varepsilon^{klm} \llbracket \mathcal{H}_m \rrbracket n_k = 0, \quad (5.102)$$

$$\left[\left[\frac{q^k}{T} \right] \right] n_k = \tilde{s}_{(n)}. \quad (5.103)$$

Powyższe równania, wraz z tymi przez nas założonymi (5.3), (5.4), (5.7) i (5.14), tworzą kompletny zestaw lokalnych praw równowagi opisujących termo-elektrodynamikę ciekłych kryształów. Równanie

$${}_M t^k{}_{l,k} - G_{l,t} = 0, \quad \text{w } V - \mathcal{V}, \quad (5.104)$$

wynika z właśnie co sformułowanych równań Maxwella. Dodatkowo, z warunków znikania współczynników wariacji $\delta\Theta$, otrzymuje się równania (5.93) i (5.103). Te wyrażenia są interpretowane jako warunki na postać

zasady wariacyjnej opisującej procesy nieodwracalne. Drugie prawo termodynamiki nie wynika jak na razie z przedstawionego formalizmu i tu musimy je zapostulować:

$$\rho\gamma \geq 0, \quad \text{w } \mathcal{V}, \quad (5.105)$$

$$\tilde{s}_{(n)} \geq 0, \quad \text{na } \partial\mathcal{V}. \quad (5.106)$$

Zauważmy, że biorąc pod uwagę prawo zachowania ładunku elektrycznego (5.14) możemy zapisać energię dyssypowaną (5.84) w opisie lagrangowskim jako

$$\begin{aligned} {}_{\mathbf{D}}U = \int_{\mathcal{V}_0} \left\{ {}_{\mathbf{D}}T^{LK} \delta \mathfrak{E}_{KL} + {}_{\mathbf{D}}M^{LK} \delta \Gamma_{KL} \right. \\ \left. + \frac{Q^K}{T} \delta(\Theta_{,K}) + \mathcal{J}^K \delta \zeta_K - \rho_0 \gamma \delta \Theta \right\} dv_0, \end{aligned} \quad (5.107)$$

gdzie

$$\begin{aligned} {}_{\mathbf{D}}T^{KL} &= \frac{\rho_0}{\rho} X^K_{,k} \chi_l^L {}_{\mathbf{D}}t^{kl}, \\ {}_{\mathbf{D}}M^{KL} &= \frac{\rho_0}{\rho} X^K_{,k} \chi_l^L {}_{\mathbf{D}}m^{kl}, \\ Q^K &= \frac{\rho_0}{\rho} X^K_{,k} q^k, \\ \mathcal{J}^K &= \frac{\rho_0}{\rho} X^K_{,k} \mathcal{J}^k. \end{aligned} \quad (5.108)$$

Zgodnie z nierównością Clausiusa - Duhema, prawo produkcji entropii (5.93) dane jest w opisie Lagrange'a jako [47], [48]

$$\rho_0 \gamma = \frac{1}{T} \left[{}_{\mathbf{D}}T^{KL} \dot{\mathfrak{E}}_{LK} + {}_{\mathbf{D}}M^{KL} \dot{\Gamma}_{LK} + \frac{Q^K}{T} T_{,K} + \mathcal{J}^K \mathcal{E}_K \right]. \quad (5.109)$$

Zakładając stałą temperaturę ciała w stanie podstawowym ($T_0 = \text{const.}$) otrzymujemy

$$\begin{aligned}
{}_D U = \int_{v_0} \left\{ & {}_D T^{LK} \left(\delta \mathbf{e}_{KL} - \frac{1}{T} \dot{\mathbf{e}}_{KL} \delta \Theta \right) \right. \\
& + {}_D M^{LK} \left(\delta \Gamma_{KL} - \frac{1}{T} \dot{\Gamma}_{KL} \delta \Theta \right) \\
& + \frac{Q^K}{T} \left[\delta(\Theta_{,K}) - \frac{1}{T} \dot{\Theta}_{,K} \delta \Theta \right] \\
& \left. + \mathcal{J}^K \left(\delta \zeta_K - \frac{1}{T} \dot{\zeta}_K \delta \Theta \right) \right\} dv_0.
\end{aligned} \tag{5.110}$$

W naszym podejściu wariacyjnym założyliśmy, że znamy relacje konstytutywne (5.67), (5.68), (5.70) dla wielkości równowagowych.

Składniki dyssypatywne ${}_D \mathbf{T}$, ${}_D \mathbf{M}$, \mathbf{Q}/T i \mathcal{J} dane w (5.108) są funkcjami wektorowymi i tensorowymi zależnymi w konfiguracji odniesienia od następujących zmiennych konstytutywnych

$$\rho_0^{-1}, \mathfrak{J}, \mathbf{e}, \mathbf{\Gamma}^T, \dot{\mathbf{e}}, \dot{\mathbf{\Gamma}}^T, T, \nabla T, \boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{B}.$$

Postać wielomianowa równań konstytutywnych dla pól nierównowagowych jest ograniczona aksjomatem obiektywności, drugim prawem termodynamiki i aksjomatem odwracalności czasu [44], [47], [48]. Drugie prawo termodynamiki dla ciekłych kryształów, wrażliwych na działanie pól termo-elektromechanicznych, prowadzi do uogólnionej nierówności Clausiusa - Duhema, która w tym przypadku w konfiguracji odniesienia przyjmuje następującą postać

$${}_D T^{KL} \dot{\mathbf{e}}_{LK} + {}_D M^{KL} \dot{\Gamma}_{LK} + \frac{Q^K}{T} T_{,K} + \mathcal{J}^K \boldsymbol{\varepsilon}_K \geq 0, \tag{5.111}$$

Nierównowagowe wielomianowe równania konstytutywne dla nematycznych ciekłych kryształów w konfiguracji odniesienia, zgodnie z teorią równań konstytutywnych rozwiniętą przez Eringenę [44], są liniowe względem pól

$$\dot{\mathbf{e}}, \dot{\mathbf{\Gamma}}^T, \nabla T, \boldsymbol{\varepsilon}$$

oraz ich iloczynów z \mathfrak{J} , gdyż \mathfrak{J} jest wskaźnikiem anizotropii. W pierwszym przybliżeniu, inne efekty nieliniowe są zanedbywalne.

Ponadto wyłączymy Γ^T ze zbioru niezależnych zmiennych konstytutywnych w członach nierównowagowych, gdyż ani lepkosprężyste efekty obrotowe ani efekty wyższego rzędu nie są uwzględniane w liniowych równaniach konstytutywnych [44].

Tak więc, w konfiguracji odniesienia nematycznych ciekłych kryształów dopuszczalne są następujące nierównowagowe wielomianowe związki konstytutywne:

$$\begin{aligned}
{}_D T^{KL} &= \alpha^{LKMN} \dot{\mathfrak{C}}_{MN}, \\
{}_D M^{KL} &= \beta^{LKMN} \dot{\Gamma}_{MN} + {}_T \beta^{LKM} T_{,M} + {}_e \beta^{LKM} \mathfrak{E}_M, \\
\frac{Q^K}{T} &= k^{KL} T_{,L} + {}_e k^{KL} \mathfrak{E}_L - {}_T \beta^{MLK} \dot{\Gamma}_{ML}, \\
\mathcal{J}^K &= \sigma^{KL} \mathfrak{E}_L + {}_T \sigma^{KL} T_{,L} - {}_e \beta^{MLK} \dot{\Gamma}_{ML},
\end{aligned} \tag{5.112}$$

gdzie

$$\begin{aligned}
\alpha^{KLMN} &\equiv \frac{\rho_0}{\rho} \left\{ (\alpha_1 + \alpha_2 \text{tr} \mathfrak{J}) \mathfrak{C}^{-1KL} \mathfrak{C}^{-1NM} \right. \\
&\quad + \alpha_3 (\mathfrak{C}^{-1RL} \mathfrak{C}^{-1NM} \mathfrak{J}_R^K + \mathfrak{C}^{-1KL} \mathfrak{C}^{-1RM} \mathfrak{J}_R^N) \\
&\quad + (\alpha_5 + \alpha_6 \text{tr} \mathfrak{J}) \mathfrak{C}_R^{-1L} \mathfrak{C}^{-1RM} \delta^{KN} \\
&\quad + (\alpha_7 + \alpha_8 \text{tr} \mathfrak{J}) \mathfrak{C}^{-1NL} \mathfrak{C}^{-1KM} \\
&\quad + \alpha_9 (\mathfrak{C}^{-1RL} \mathfrak{C}^{-1SM} \mathfrak{J}_{RS} \delta^{KM} + \mathfrak{C}_R^{-1L} \mathfrak{C}^{-1RM} \mathfrak{J}^{KN}) \\
&\quad \left. + \alpha_{11} \mathfrak{C}^{-1RL} \mathfrak{C}^{-1KM} \mathfrak{J}_R^N + \alpha_{12} \mathfrak{C}^{-1NL} \mathfrak{C}^{-1RM} \mathfrak{J}_R^K \right\},
\end{aligned} \tag{5.113}$$

$$\begin{aligned}
{}_T \beta^{KLM} &\equiv \varepsilon^{MLN} \left[(\beta_{13} + \beta_{14} \text{tr} \mathfrak{J}) \mathfrak{C}_N^K + \beta_{16} \mathfrak{C}_N^P \mathfrak{J}_P^K \right] \\
&\quad + \varepsilon^{MPQ} \beta_{15} \mathfrak{C}_P^N \mathfrak{C}_Q^K \mathfrak{C}_R^{-1L} \mathfrak{J}_N^R,
\end{aligned} \tag{5.114}$$

$$\begin{aligned}
\beta^{KLM} \equiv \varepsilon^{MLN} & \left[(\beta_{17} + \beta_{18} \text{tr} \mathfrak{J}) \mathfrak{E}_N^K + \beta_{20} \mathfrak{E}_N^P \mathfrak{J}_P^K \right] \\
& + \varepsilon^{MPQ} \beta_{19} \mathfrak{E}_P^N \mathfrak{E}_Q^K \mathfrak{E}_R^L \mathfrak{J}_N^R,
\end{aligned} \tag{5.115}$$

$$\begin{aligned}
\beta^{KLMN} \equiv \frac{\rho_0}{\rho} & \left\{ (\beta_1 + \beta_2 \text{tr} \mathfrak{J}) \mathfrak{E}^{-1KL} \mathfrak{E}^{-1MN} \right. \\
& + \beta_3 (\mathfrak{E}^{-1KL} \mathfrak{E}^{-1RN} \mathfrak{J}_R^M + \mathfrak{E}^{-1MN} \mathfrak{E}^{-1LR} \mathfrak{J}_R^K) \\
& + (\beta_5 + \beta_6 \text{tr} \mathfrak{J}) \mathfrak{E}^{-1KN} \mathfrak{E}^{-1ML} \\
& + (\beta_7 + \beta_8 \text{tr} \mathfrak{J}) \mathfrak{E}_R^L \mathfrak{E}^{-1RN} \delta^{KM} \\
& + \beta_9 (\mathfrak{E}^{-1RL} \mathfrak{E}^{-1KN} \mathfrak{J}_R^M + \mathfrak{E}^{-1ML} \mathfrak{E}^{-1RN} \mathfrak{J}_R^K) \\
& \left. + \beta_{11} \mathfrak{E}_R^L \mathfrak{E}_S^N \mathfrak{J}^{RS} \delta^{KM} + \beta_{12} \mathfrak{E}_R^L \mathfrak{E}^{-1RN} \mathfrak{J}^{KM} \right\},
\end{aligned} \tag{5.116}$$

$$k^{KL} \equiv \frac{\rho_0}{\rho} \left[(\kappa_1 + \kappa_2 \text{tr} \mathfrak{J}) \mathfrak{E}^{-1ML} + \kappa_3 \mathfrak{E}_N^L \mathfrak{J}^{MN} \right] \mathfrak{E}_M^K, \tag{5.117}$$

$$\sigma^{KL} \equiv \frac{\rho_0}{\rho} \left[(\sigma_1 + \sigma_2 \text{tr} \mathfrak{J}) \mathfrak{E}^{-1ML} + \sigma_3 \mathfrak{E}_N^L \mathfrak{J}^{MN} \right] \mathfrak{E}_M^K, \tag{5.118}$$

$${}_{\circ}k^{KL} \equiv \frac{\rho_0}{\rho} \left[(\kappa_4 + \kappa_5 \text{tr} \mathfrak{J}) \mathfrak{E}^{-1ML} + \kappa_6 \mathfrak{E}_N^L \mathfrak{J}^{MN} \right] \mathfrak{E}_M^K, \tag{5.119}$$

$${}_{\mathbf{T}}\sigma^{KL} \equiv \frac{\rho_0}{\rho} \left[(\sigma_4 + \sigma_5 \text{tr} \mathfrak{J}) \mathfrak{E}^{-1ML} + \sigma_6 \mathfrak{E}_N^L \mathfrak{J}^{MN} \right] \mathfrak{E}_M^K, \tag{5.120}$$

oraz gdzie

$$\mathfrak{E}^{-1MN} \equiv \chi^{kM} X^N{}_{,k} = \frac{1}{2 \det \mathfrak{E}} \varepsilon^{NRS} \varepsilon^{MPQ} \mathfrak{E}_{RP} \mathfrak{E}_{SQ}, \tag{5.121}$$

i

$$\frac{\rho_0}{\rho} = \det \mathfrak{X} \det \mathfrak{E}, \quad \det \mathfrak{X} = \pm 1. \tag{5.122}$$

Podstawiając (5.112) do (5.108) dostajemy wielomianowe nierównowagowe równania konstytutywne otrzymane przez Eringena [44] dla składowych dyssypatywnych nematyków w konfiguracji bieżącej. Rozważania dotyczące warunków na współczynniki materiałowe $\alpha_1 \div \alpha_{12}$, $\beta_1 \div \beta_{20}$, $\kappa_1 \div \kappa_6$ i $\sigma_1 \div \sigma_6$ wynikające z ograniczeń narzucanych przez termodynamikę są przedstawione również w pracy [44].

Pokazaliśmy, że podstawowe prawa równowagi otrzymane z postulowanej zasady wariacyjnej (5.82) wraz z tymi przez nas założonymi (5.3), (5.4), (5.7) i (5.14) w naszym podejściu wariacyjnym i uzupełnionymi przez równania konstytutywne, tworzą kompletny układ równań opisujących ciekłe kryształy oddziaływujące z polem elektromagnetycznym, mechanicznym i temperatury. Nasze podejście wariacyjne włącza w formalizm zarówno stany równowagowe jak i nierównowagowe ciekłych kryształów, a więc pozwala na rozważanie również procesów dyssypatywnych.

Zaproponowana zasada wariacyjna (5.82) dla prostego ośrodka mikropolarnego ma postać uniwersalną i może być stosowana do opisu innych typów ośrodków ciągłych oddziaływujących z polami zewnętrznymi. Ciekłe kryształy zostały wybrane ze względu na ich duże znaczenie praktyczne. Szczegółowe obliczenia i otrzymane wyniki przedstawiono w Dodatku.

Rozdział 6

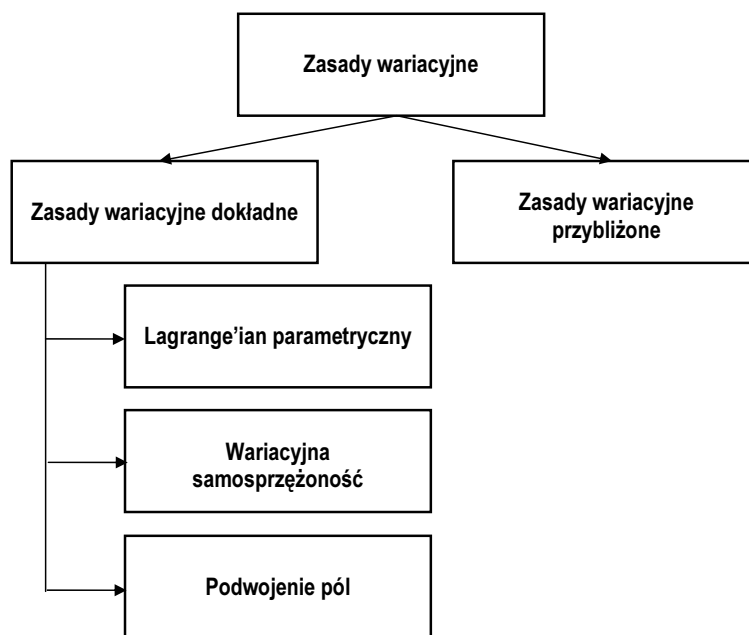
Formalizm Lagrange'a w opisie procesów dyssypatywnych

Jak to pokazaliśmy w poprzednich rozdziałach, narzędziem matematycznym dobrze służącym do opisu procesów fizycznych, zarówno dyssypatywnych jak i niedyssypatywnych, jest rachunek wariacyjny. Od wielu lat podejmowane są liczne próby połączenia go z teoriami wychodzącymi z pierwszych zasad. Należy tu przede wszystkim wymienić prace Santilli'ego [125], [126], [127], [128], [129], który sformułował ogólne warunki jakie muszą być spełnione, by układ równań dało się zapisać w postaci zasady wariacyjnej, Kaufmana [71], Grmeli [58], Brocketa [35] i Blocha et al. [32] wykorzystujące uogólnione nawiasy Poissona, Sieniutycza [135] oraz Bampi i Morro [23], [24].

Wśród wielu sformułowanych dotychczas zasad wariacyjnych jedna zasługuje na specjalne wyróżnienie. Jest to zasada wariacyjna Hamiltona. Zasada wariacyjna Hamiltona stanowi pierwszą część formalizmu Lagrange'a i pozwala otrzymać równania Eulera-Lagrange'a (równania ruchu lub równania pola) wraz z warunkami brzegowymi, czyli komplet równań pozwalających w sposób jednoznaczny opisać badany problem fizyczny. Druga część formalizmu Lagrange'a, dzięki zastosowaniu twierdzenia Noether, pozwala otrzymać związki konstytutywne i prawa zachowania. W formalizmie Lagrange'a można wyróżnić i trzecią część, gdy wykorzystując dodatkowy problem wariacyjny (ale oparty na poprzednim sformułowaniu) możemy badać warunki stabilności. Jak pokażemy poniżej, podejmowane próby włączenia formalizmu Lagrange'a do opisu procesów dyssypatywnych nie są jednak w pełni zadowalające i wymagają dalszych badań. Podejściu temu poświęcone są liczne prace Anthony'ego i jego uczniów, np. [15], [16], [20], [21], [131].

6.1. Klasyfikacja zasad wariacyjnych i formalizm Lagrange'a

Klasyfikacji zasad wariacyjnych w termodynamice dokonali Muschik i Trostel w pracy [102]. Podano tam bogatą literaturę zagadnienia. W swym przeglądzie autorzy główną uwagę poświęcili zasadom *globalnym*, charakteryzowanym przez odpowiednie lagrangiany. Lokalne zasady wariacyjne, takie jak zasada produkcji minimum entropii, nie były przez nich klasyfikowane. Globalne zasady wariacyjne podzielili na dwie grupy: na zasady wariacyjne dokładne (*strict*) i na zasady wariacyjne przybliżone (*nonstrict*), a z kolei zasady wariacyjne dokładne podzielili na trzy grupy: z lagrangianem parametrycznym, wariacyjna samosprężoność i podwojenie pól (patrz rysunek 6.1).



Rys. 6.1. Klasyfikacja zasad wariacyjnych.

Tutaj zajmiemy się tylko takimi zasadami wariacyjnymi, które wykorzystują podwojenie pól [76].

Rozważmy funkcję $\mathcal{L}(T, \partial T)$ temperatury T i pochodnych temperatury ∂T jako kandydata na lagrangian opisujący przewodnictwo ciepła

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}(T, \partial T). \quad (6.1)$$

Ponieważ strumień energii [19] wynikający z twierdzenia Noether

$$\mathbf{j}_{(u)} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_x T)} \partial_t T, \quad (6.2)$$

znika w przypadku stacjonarnym, więc jest to sprzeczne z eksperymentem. Sytuacja może być poprawiona, jeśli do lagrangianu dodać jedno dodatkowe pole zmienne w czasie, np. $\phi(t, x)$ (tutaj i niżej x reprezentuje wszystkie zmienne przestrzenne), i wtedy nawet dla temperatury stałej w czasie $T = T(x)$ będziemy mieli nieznikający strumień energii, gdyż w takiej sytuacji

$$\mathbf{j}_{(u)} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_x T)} \partial_t T + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_x \phi)} \partial_t \phi. \quad (6.3)$$

Przypomnijmy teraz pokrótce podstawy formalizmu Lagrange'a. Jeśli lagrangian \mathcal{L} zależy od n funkcji $\psi_i(t, x)$ oraz ich pierwszych pochodnych względem czasu i zmiennych przestrzennych, czyli

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}(\psi_i(t, x), \partial_t \psi_i(t, x), \partial_x \psi_i(t, x)), \quad (6.4)$$

to równania Eulera-Lagrange'a przyjmują postać

$$\partial_t \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_t \psi_i)} + \partial_x \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_x \psi_i)} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_i} = 0. \quad (6.5)$$

Prawa zachowania i związki konstytutywne dla poniższych wielkości otrzymujemy z twierdzenia Noether:

1. *energia* (niezmienniczość względem translacji czasu $t \rightarrow t + \Delta t$)
 - a. gęstość energii u

$$u = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_t \psi_i)} \partial_t \psi_i - \mathcal{L}, \quad (6.6)$$

- b. gęstość strumienia energii $\mathbf{j}_{(u)}$

$$\mathbf{j}_{(u)} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_x \psi_i)} \partial_t \psi_i, \quad (6.7)$$

2. *pęd* (niezmienniczość względem translacji przestrzennych $x \rightarrow x + \Delta x$)

a. gęstość pędu

$$\mathbf{p} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_t \psi_i)} \partial_x \psi_i, \quad (6.8)$$

b. gęstość strumienia pędu

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_x \psi_i)} \otimes \partial_x \psi_i - \hat{\mathbf{I}} \cdot \mathcal{L}, \quad (6.9)$$

c. prawo zachowania pędu

$$\partial_t \mathbf{p} + \text{div } \hat{\boldsymbol{\sigma}} = 0. \quad (6.10)$$

3. *wielkości typu masy* (niezmienniczość względem transformacji cechowania $\psi \rightarrow \psi \exp(i\Lambda\epsilon)$)

a. funkcja gęstości wielkości typu masy

$$w = i\Lambda \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_t \psi_i)} \psi - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_t \psi_i^*)} \psi^* \right), \quad (6.11)$$

b. gęstość strumienia wielkości typu masy

$$\mathbf{j}_{(w)} = i\Lambda \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_x \psi_i)} \psi - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_x \psi_i^*)} \psi^* \right), \quad (6.12)$$

c. prawo zachowania wielkości typu masy

$$\partial_t w + \text{div } \mathbf{j}_{(w)} = 0, \quad (6.13)$$

gdzie \otimes – iloczyn tensorowy, $\alpha = 0, 1, 2, 3$; $i, j = 1, \dots, n$.

Stabilność układu można badać za pomocą dodatkowego zagadnienia wariacyjnego [18], [75]. Rozważmy jedno-parametrową grupę transformacji

$$\bar{\psi}(t, x, \epsilon) = \mathcal{T}_\epsilon \psi(t, x), \quad (6.14)$$

jedno-parametrowej klasy rzeczywistych procesów spełniających równania Eulera-Lagrange'a. Wyrażenie

$$\eta_i(t, x) = \left. \frac{\partial \psi_i(t, x, \epsilon)}{\partial \epsilon} \right|_{\epsilon=0}, \quad (6.15)$$

definiuje wariacje procesów $\psi_i(t, x)$ względem parametru ϵ

$$\delta\psi_i = \eta_i \delta\epsilon. \quad (6.16)$$

Warunkiem koniecznym na to, aby funkcjonal \mathcal{J} posiadał ekstremum, jest znikanie jego pierwszej wariacji (co jest zapewnione przez równania Eulera-Lagrange'a), a druga wariacja funkcjonału dla rozwiązań równań Eulera-Lagrange'a powinna spełniać warunek

$$\delta^2 \mathcal{J} = \begin{cases} > 0 & \text{dla minimum,} \\ < 0 & \text{dla maksimum.} \end{cases} \quad (6.17)$$

Założmy, że

$$\delta\mathcal{J} = \delta^1 \mathcal{J} + \delta^2 \mathcal{J} + \beta(\delta\psi)^2, \quad (6.18)$$

gdzie

$$\mathcal{J} = \mathcal{J}(\psi, \partial\psi, \delta\psi, \delta\partial\psi), \quad (6.19)$$

i

$$\lim_{\delta\psi \rightarrow 0} \beta = 0, \quad (6.20)$$

$$\delta^1 J = \delta \epsilon \left. \frac{d\mathcal{J}}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=0} = \int_{\mathcal{P}} d^4x \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_i} \delta\psi_i + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\alpha \psi_i)} \delta(\delta_\alpha \psi_i) \right), \quad (6.21)$$

$$\begin{aligned} \delta^2 J = \frac{1}{2} \delta^2 \epsilon \left. \frac{d^2 \mathcal{J}}{d\epsilon^2} \right|_{\epsilon=0} = & \\ \frac{1}{2} \int_{\mathcal{P}} d^4x \left(\frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial \psi_i \partial \psi_j} \delta\psi_i \delta\psi_j + 2 \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial \psi_i \partial (\partial_\alpha \psi_i)} \delta\psi_i \delta(\delta_\alpha \psi_j) + \right. & \\ \left. \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial (\partial_\alpha \psi_i) \partial (\partial_\beta \psi_j)} \delta(\partial_\alpha \psi_i) \delta(\delta_\beta \psi_j) \right). & \end{aligned} \quad (6.22)$$

Wiadomo [123], że z każdym równaniem różniczkowym można związać jego równanie wariacyjne. Równaniami wariacyjnymi dla równań Eulera-Lagrange'a

$$\mathcal{L}_i = d_\alpha \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\alpha \psi_i)} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_i} = 0, \quad (6.23)$$

są równania Jacobiego

$$\Omega_i = d_\alpha \frac{\partial \Omega}{\partial (\partial_\alpha \psi_i)} - \frac{\partial \Omega}{\partial \psi_i} = 0, \quad (6.24)$$

przy czym jądro Ω ma postać

$$\begin{aligned} 2\Omega(\psi, \partial\psi, \eta, \partial\eta) = & \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial \psi_i \partial \psi_j} \eta_i \eta_j + 2 \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial \psi_i \partial (\partial_\alpha \psi_j)} \eta_i (\partial_\alpha \eta_j) + \\ & \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial (\partial_\alpha \psi_i) \partial (\partial_\beta \psi_j)} (\partial_\alpha \eta_i) (\partial_\beta \eta_j). \end{aligned} \quad (6.25)$$

Wariacje $\eta_i(t, x)$ są rozwiązaniami równań Jacobiego. Jeśli wykorzystamy teraz wzór Eulera dla funkcji jednorodnych drugiego rzędu (tutaj jest to forma kwadratowa $\Omega(\psi, \partial\psi, \eta, \partial\eta)$ i równania Jacobiego (6.24), to otrzymamy następujące wyrażenia:

— niejednorodne prawo zachowania (równanie równowagi)

$$\partial_t s + \operatorname{div} \mathbf{j}_{(s)} = \sigma_{(s)}, \quad (6.26)$$

— funkcję gęstości

$$s = \frac{\partial \Omega}{\partial (\partial_t \eta_i)} \eta_i, \quad (6.27)$$

— wektor strumienia gęstości

$$\mathbf{j}_{(s)} = \frac{\partial \Omega}{\partial (\nabla \eta_i)} \eta_i, \quad (6.28)$$

— gęstość prędkości produkcji

$$\sigma_{(s)} = 2\Omega. \quad (6.29)$$

Równania (6.25)–(6.29) związane z grupą procesów transformacji (6.14) definiują tzw. obserwable drugiego rodzaju.

6.2. Podejście Morse'a i Feschbacha

W swej słynnej książce [98] Morse i Feschbach podali kilka przykładów jak można otrzymać równania opisujące układy dyssypatywne z zasady Hamiltona i poprzez zastosowanie zanurzenia Batemana. Proponują oni, żeby w celu skonstruowania metody pozwalającej na jednakowe traktowanie układów konserwatywnych i dyssypatywnych, wraz z właściwym równaniem rozważać równocześnie jego *zwierciadlany obraz*. Zaproponowaną metodę przedyskutujemy na przykładzie jednowymiarowego oscylatora z tłumieniem

$$m \ddot{x} + R \dot{x} + K x = 0. \quad (6.30)$$

lagrangian, z którego można otrzymać powyższe równanie, ma postać

$$\mathcal{L} = m(\dot{x} \dot{x}^*) - \frac{1}{2}R(x^* \dot{x} - x \dot{x}^*) - K x x^*, \quad (6.31)$$

gdzie x^* reprezentuje *zwierciadlany* oscylator z ujemnym tarciem. Równania ruchu (równania Lagrange'a) są następujące:

$$m \ddot{x}^* - R \dot{x}^* + K x^* = 0, \quad m \ddot{x} + R \dot{x} + K x = 0. \quad (6.32)$$

Wariacja lagrangianu (6.31) ze względu na zmienną x^* daje nam równanie (6.30), a ze względu na zmienną x – równanie z ujemnym tarciem. Jeśli skorzystamy z definicji pędu kanonicznego [98] dla r -tej współrzędnej uogólnionej q_r

$$p_r = \frac{\partial L(q_r, \partial_t q_r, \partial_x q_r)}{\partial(\partial_t q_r)}, \quad (6.33)$$

to w naszym przypadku otrzymamy dwa pędy

$$p = m \dot{x}^* - \frac{1}{2}R x^*, \quad p^* = m \dot{x} + \frac{1}{2}R x^*. \quad (6.34)$$

Wyrażenia te, podobnie jak równanie (6.32a), nie dadzą się uzasadnić na gruncie mechaniki klasycznej.

Kolejnymi przykładami równań opisujących systemy dyssypatywne, to podobne w formie równanie dyfuzji i równanie przewodnictwa ciepła. Dla tych równań Morse i Feschbach zaproponowali następujący lagrangian

$$\mathcal{L} = -(\text{grad } \psi) \cdot (\text{grad } \psi^*) - \frac{1}{2}a^2(\psi^* \partial_t \psi - \psi \partial_t \psi^*), \quad (6.35)$$

gdzie ψ – gęstość dyfundującej materii lub temperatura, ψ^* – odnosi się do *zwierciadlanego* układu, a^2 – stała dyfuzji lub przewodnictwa cieplnego. Równania pola (równania Eulera) dla tej gęstości lagrangianu są następujące:

$$\Delta\psi = a^2\partial_t\psi, \quad \Delta\psi^* = -a^2\partial_t\psi^*. \quad (6.36)$$

Równanie na ψ jest równaniem wyjściowym, a równanie na ψ^* jest równaniem dla układu *zwierciadlanego*, który pozyskuje tyle energii, ile ten pierwszy układ oddaje. Wyliczone gęstości pędu kanonicznego

$$p = -\frac{1}{2}a^2\psi^*, \quad p^* = -\frac{1}{2}a^2\psi, \quad (6.37)$$

podobnie jak w poprzednim przykładzie, są trudne do fizycznego uzasadnienia.

6.3. Podejście Djukicia i Vujanovicia

Djukic i Vujanovic [42], [151] zaproponowali inną metodę prowadzącą do otrzymania równań termodynamiki procesów nieodwracalnych za pośrednictwem zasady Hamiltona. Założyli oni, że lagrangian zależy nie tylko od zmiennych pola (np. od temperatury bezwzględnej $T = T(t, x)$) i ich pierwszych pochodnych, ale również od pewnego zbioru dowolnych funkcji $\Psi_k(t, x, \lambda)$, $k = 1, 2, \dots, N$ o następujących właściwościach:

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \Psi_k(t, x, \lambda) = 0, \quad (6.38)$$

oraz

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \partial_x \Psi_k = 1, \quad \lim_{\lambda \rightarrow 0} \partial_t \Psi_k = 1. \quad (6.39)$$

Pokażemy teraz, jak ta metoda działa w przypadku równania przewodnictwa ciepła. W pracy [42] zaproponowano następujący lagrangian

$$\mathcal{L} = \frac{k^2(T)}{2}(\partial_x T)^2 - \frac{\Psi(t, \lambda)}{2} \rho(T) c(T) k(T) (\partial_t T)^2. \quad (6.40)$$

Tutaj $\rho(T)$ – gęstość masy, $k(T)$ – przewodnictwo ciepła, $c(T)$ – pojemność cieplna. Jeśli funkcja $\Psi(t, x)$ nie podlega wariacjom, to równanie Eulera-Lagrange'a przyjmuje postać

$$\begin{aligned} & \partial_x[k(T)\partial_x T] - \rho(T)c(T)\partial_t T \partial_t \Psi(t, \lambda) = \\ & \frac{\Psi(t, \lambda)}{k(T)} \left[\partial_t[\rho(T)c(T)k(T)(\partial_t T)] - \frac{1}{2}\partial_T[\rho(T)c(T)k(T)(\partial_t T)^2] \right]. \end{aligned} \quad (6.41)$$

Jeśli teraz wykorzystamy równania (6.38) i (6.39) i przejdziemy do granicy z λ w równaniu (6.41), to otrzymamy jednowymiarowe równanie przewodnictwa ciepła ze współczynnikami zależnymi od temperatury

$$\rho(T)c(T)\partial_t T = \partial_x[k(T)\partial_x T]. \quad (6.42)$$

Gdybyśmy teraz spróbowali zastosować twierdzenie Noether do lagrangianu (6.41), to otrzymalibyśmy następujące wyniki:

— gęstość energii wewnętrznej

$$u = -\frac{k^2}{2(\nabla T)^2}, \quad (6.43)$$

— strumień energii wewnętrznej

$$j = k^2(T)\partial_x T \partial_t T, \quad (6.44)$$

— ciśnienie

$$p = 0, \quad (6.45)$$

— naprężenie

$$\sigma = k^2(\nabla t)^2, \quad (6.46)$$

a wszystkie te wyniki są sprzeczne ze znanymi teoriami i z eksperymentem. W pracy [151] otrzymano równanie (6.42) oraz na podstawie innego lagrangianu równanie przewodnictwa ciepła uwzględniające skończoną prędkość propagacji ciepła

$$\mathcal{L} = \left(\frac{k^2(T)}{2}(\partial_x T)^2 - \frac{\tau}{2}S(T)k(T)(\partial_t T)^2 \right) \exp(t/\tau). \quad (6.47)$$

Wprowadzono tutaj dodatkowy mały parametr – czas relaksacji τ . Równanie Eulera-Lagrange'q przyjmuje postać

$$\partial_x(k(T) \partial_x T) - S(T) \partial_t T = \frac{\tau}{k(T)} \left[\partial_t (S(T) k(T) \partial_t T) - \frac{1}{2} \partial_t (S(T) k(T) (\partial_t T)^2) \right]. \quad (6.48)$$

Tutaj $S(T)$ – objętościowa pojemność cieplna (iloczyn gęstości masy i pojemności cieplnej przy stałym ciśnieniu). Otrzymano również trzywymiarowy wariant równania (6.42) jako graniczny przypadek równania (6.48) z $\tau \rightarrow 0$. Związki konstytutywne otrzymane z twierdzenia Noether są podobnej jakości jak poprzednie.

6.4. Podejście Anthony'ego

Podejście Anthony'ego do lagrangowskiego opisu termodynamiki procesów nieodwracalnych, zgodnie z terminologią podaną przez Muschika i Trostela [102], może być zaliczone do grupy teorii z podwajaniem pól, lecz różni się ono bardzo istotnie od wszystkich teorii dotychczas tu wymienionych. Morse i Feschbach oraz Djukic i Vujanovic zatrzymali swą analizę na równaniach Eulera-Lagrange'a. Nie zrobili następnego kroku i nie badali symetrii lagrangianu, a więc nie mogli i nie zastosowali twierdzenia Noether do swych lagrangianów. Podejście Anthony'ego jest bardziej ogólne. On podjął próbę zastosowania pełnego formalizmu Lagrange'a: cała informacja o systemie jest zawarta w lagrangianie, równania ruchu Eulera-Lagrange'a (równania pola) można otrzymać z zasady wariacyjnej Hamiltona, równania konstytutywne i prawa zachowania można otrzymać z twierdzenia Noether, a stabilność układu można badać wykorzystując pomocnicze zagadnienie wariacyjne [123].

Anthony opublikował swą teorię w serii prac (np. [15], [16], [17], [18], [19]). Tutaj przedstawimy tylko główne punkty jego teorii na przykładzie problemu przewodnictwa ciepła, aby uwypuklić różnice pomiędzy jego podejściem, a poprzednimi próbami zunifikowania teoretycznego opisu procesów odwracalnych i nieodwracalnych zachodzących w przyrodzie.

6.4.1. Przewodnictwo ciepła

Podstawowym i nowym pomysłem wprowadzonym przez Anthony'ego jest pole wzbudzeń termicznych $\psi(t, x)$ o wartościach zespolonych i takim, że

$$\psi(t, x) \psi(t, x)^* = T(t, x) \geq 0. \quad (6.49)$$

Zwróćmy uwagę, że temperatura bezwzględna $T(t, x)$ jest od samego początku dodatnio określona, co wcale nie wynika z klasycznego równania przewodnictwa ciepła i nie musi tu być dodatkowo zakładana. Taka reprezentacja wielkości dodatnio określonej jest znana w fizyce i nosi nazwę reprezentacji Borna. Z (6.49) wynika, że $\psi(t, x)$ może być przedstawione w postaci

$$\psi(t, x) = \sqrt{T(t, x)} e^{i\varphi(t, x)}, \quad (6.50)$$

gdzie faza $\varphi(t, x)$ jest pewną nieznaną funkcją. W związku z tym, również wszystkie inne wielkości możemy teraz przedstawiać albo w reprezentacji (ψ, ψ^*) albo w reprezentacji (T, φ) . Dotyczy to oczywiście i lagrangianu:

— lagrangian Anthony'ego w reprezentacji (ψ, ψ^*)

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & -c \psi \psi^* - \\ & \frac{c}{\omega} \left[\frac{i}{2} (\psi \partial_t \psi^* - \psi^* \partial_t \psi) + \frac{T_0}{2\psi \psi^*} \log \frac{\psi \psi^*}{T_0} \partial_t (\psi \psi^*) \right] + \\ & \frac{1}{\omega} \hat{\lambda}.. \left[\frac{i}{2\psi \psi^*} (\psi^2 \nabla \psi^* \otimes \nabla \psi^* - \psi^{*2} \nabla \psi \otimes \nabla \psi) + \right. \\ & \left. \frac{T_0}{2(\psi \psi^*)^2} \nabla (\psi \psi^*) \otimes \nabla (\psi \psi^*) \right], \end{aligned} \quad (6.51)$$

— lagrangian Anthony'ego w reprezentacji (T, φ)

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & -cT - \frac{c}{\omega} \left(T \partial_t \varphi + \frac{1}{2} \frac{\ln \frac{T}{T_0}}{\frac{T}{T_0}} \partial_t T \right) + \\ & \frac{1}{\omega} \hat{\lambda}.. \left(\nabla T \otimes \nabla \varphi + \frac{T_0}{2T^2} \nabla T \otimes \nabla T \right), \end{aligned} \quad (6.52)$$

gdzie .. – sumowanie po dwu wskaźnikach, ω – stała o wymiarze częstości, c – ciepło właściwe, $\hat{\lambda} = (\lambda^{ij})$ – tensor przewodnictwa ciepła, T_0 – temperatura odniesienia.

Aparat formalizmu Lagrange'a daje

— równania pola

$$c \partial_t T - \hat{\lambda} \cdot \nabla \otimes \nabla T = 0, \quad (6.53)$$

$$c \partial_t \varphi - \hat{\lambda} \cdot \nabla \otimes \nabla \varphi = -c \omega - \hat{\lambda} \cdot \left(\frac{T_0}{T^2} \nabla \otimes \nabla T - \frac{T_0}{T^3} \nabla T \otimes \nabla T \right), \quad (6.54)$$

— warunki brzegowe

$$\frac{1}{\omega} \mathbf{n} (\hat{\lambda} \cdot \nabla T) = 0, \quad \frac{1}{\omega} \mathbf{n} (\hat{\lambda} \cdot \nabla \varphi) = 0, \quad (6.55)$$

— rozwiązanie szczególne $\varphi(t, x)$ równania (6.54), jeśli znamy rozwiązanie równania (6.53)

$$\varphi(t, x) = -\omega t + \frac{T_0}{2T(t, x)}, \quad (6.56)$$

— pole wzbudzeń termicznych

$$\psi(t, x) = \sqrt{T(t, x)} \exp \left(-i \omega t + i \frac{T_0}{2T(t, x)} \right), \quad (6.57)$$

— gęstość energii

$$u = c T - \frac{1}{\omega} \hat{\lambda} \cdot \left(\nabla T \otimes \nabla \varphi + \frac{T_0}{2T^2} \nabla T \otimes \nabla T \right), \quad (6.58)$$

a po podstawieniu szczególnego rozwiązania (6.56)

$$u = c T, \quad (6.59)$$

— gęstość strumienia energii

$$\mathbf{j}_{(u)} = \frac{1}{\omega} \hat{\lambda} \cdot \left[\left(\nabla \varphi + \frac{T_0}{T^2} \nabla T \right) \partial_t T + \nabla T \partial_t \varphi \right], \quad (6.60)$$

a po podstawieniu szczególnego rozwiązania (6.56)

$$\mathbf{j}_{(u)} = \hat{\lambda} \cdot \nabla T. \quad (6.61)$$

Powyższy przykład dotyczy oczywiście sztywnego przewodnika ciepła, więc nie uwzględniono tu mechanicznych stopni swobody. Ponadto, pokazana tu tożsamość jest spełniona dla każdego rozkładu temperatur i nie dostarcza nowych informacji o układzie.

Wielkości typu masy, po uwzględnieniu szczególnego rozwiązania (6.56), przyjmują postać

$$w = \Lambda c T, \quad \mathbf{j}_{(w)} = -\Lambda \hat{\lambda} \cdot \nabla T. \quad (6.62)$$

Entropię Anthony nazywa obserwabłą drugiego rodzaju związaną z transformacją cechowania

$$\bar{\lambda}(t, x) = \lambda(t, x) e^{u\Lambda}. \quad (6.63)$$

Można łatwo pokazać, że lagrangian Anthony'ego odtwarza podstawowe równania teorii Onsagera

— gęstość entropii

$$s = -c \ln \frac{T}{T_0}, \quad (6.64)$$

— gęstość strumienia entropii

$$\mathbf{j}_{(s)} = \frac{\hat{\lambda} \cdot \nabla T}{T}, \quad (6.65)$$

— gęstość prędkości produkcji entropii

$$\sigma_{(s)} = \frac{\nabla T \cdot \hat{\lambda} \cdot \nabla T}{T^2}. \quad (6.66)$$

Druga część drugiego prawa termodynamiki

$$\sigma_{(s)} > 0, \quad (6.67)$$

jest odtwarzana poprzez związek z teorią stabilności Lyapunova, która jest również częścią formalizmu Lagrange'a [18].

6.4.2. Dyfuzja

Najwięcej wątpliwości w stosunku do teorii typu podwajania pól dotyczy interpretacji fizycznej tych dodatkowych pól, co pokazaliśmy na przykładzie podejścia Morse'a i Feschbacha. Polem dodatkowym w podejściu Anthony'ego jest faza $\varphi(t, x)$.

Rozważmy teraz klasyczną teorię dyfuzji [85] (porównaj rozdział 3). Podstawowym równaniem opisującym dyfuzję jest prawo zachowania masy [76]

$$\partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = 0. \quad (6.68)$$

gdzie ρ – gęstość masy. Szczególna prędkość dyfuzji \mathbf{v} jest sumą prędkości ruchu chaotycznego \mathbf{u}

$$\mathbf{u} = -D \frac{\nabla \rho}{\rho}, \quad (6.69)$$

D – współczynnik dyfuzji, i prędkości konwekcji \mathbf{b} pod wpływem sił zewnętrznych

$$\mathbf{v} = \mathbf{b} + \mathbf{u}. \quad (6.70)$$

W klasycznej teorii dyfuzji zakłada się prawo Stokesa, czyli że prędkość \mathbf{b} jest proporcjonalna do siły działającej na cząsteczkę [144]

$$\mathbf{b} = \frac{1}{\zeta} \mathbf{F}(t, x), \quad (6.71)$$

$1/\zeta$ – ruchliwość cząsteczki.

Biorąc pod uwagę powyższe wzory, możemy otrzymać niejednorodne równanie dyfuzji

$$\partial_t \rho - D \Delta \rho = -\frac{1}{\zeta} \operatorname{div}(\rho \mathbf{F}). \quad (6.72)$$

Podjmiemy teraz próbę uogólnienia klasycznej teorii dyfuzji tak, aby było możliwe zastosowanie formalizmu Lagrange'a.

Relacja Stokesa [144] jest słuszna tylko dla bardzo krótkich czasów relaksacji

$$\tau \ll \tau^*, \quad (6.73)$$

gdzie $\tau = m/\zeta$ – kinematyczny czas relaksacji, m – masa cząsteczki, $\tau^* = dt = t - t_0 > 0$ – *fizycznie* infinitezymalny przedział czasu, definiujący skalę czasu obserwacji procesu dyfuzji. Wprowadźmy nowy związek konstytutywny $\mathcal{R}(\tau)$, który w granicy dla $\tau \rightarrow 0$ będzie przechodził w relację Stokesa. Zauważmy, że siła sprężysta \mathbf{F}_{el} działająca na dyfundującą cząsteczkę

$$\mathbf{F}_{\text{el}} = -V_0 \nabla \sigma_{\text{el}}, \quad (6.74)$$

jest proporcjonalna do gradientu dylatacji sprężystej ϑ , gdyż

$$\sigma_{\text{el}} = 3K \vartheta, \quad (6.75)$$

gdzie V_0 – objętość transportowana przez dyfundującą cząsteczkę. Załóżmy, że za efekty inercjalne odpowiada siła \mathbf{F}_{pl} , zależna od pewnej zmiennej wewnętrznej ξ , w podobny sposób jak ma to miejsce dla siły sprężystej \mathbf{F}_{el}

$$\mathbf{F}_{\text{pl}} = -V(\rho) \nabla \sigma_{\text{pl}}, \quad (6.76)$$

gdzie

$$V(\rho) = \frac{\rho_0}{\rho} V_0, \quad \rho_0 = \frac{m}{V_0}, \quad \sigma_{\text{pl}} = \kappa \dot{\xi}. \quad (6.77)$$

Prędkość zmiany zmiennej wewnętrznej ξ , czyli $\dot{\xi}$, interpretujemy jako prędkość plastycznej dylatacji. W tym przypadku uzyskamy niejednorodne równanie dyfuzji w postaci

$$\partial_t \rho - D \Delta \rho = \kappa \tau \Delta \dot{\xi}. \quad (6.78)$$

Rozważmy lagrangian

$$\mathcal{L} = \frac{1}{\omega} (\rho \partial_t \chi - \frac{\kappa}{2} (\nabla \chi)^2 - D \nabla \rho \cdot \nabla \chi), \quad (6.79)$$

gdzie $\chi = \tau \dot{\xi}$. Równania Eulera-Lagrange'a wynikające z (6.78) są następujące:

$$\partial_t \rho - D \Delta \rho = \kappa \Delta \chi, \quad \partial_t \chi + D \Delta \chi = 0. \quad (6.80)$$

Z porównania wzorów (6.71), (6.72) i (6.78) wynika, że

$$\mathbf{b} = \frac{\kappa \tau}{\rho} \nabla \dot{\xi} = -\frac{V(\rho)}{l_0^3} \mathbf{B}, \quad (6.81)$$

gdzie $\mathbf{B} = l_0^2 \nabla \dot{\xi}$, a $l_0 = m/\kappa \tau$ – charakterystyczna długość w procesie dyfuzji. Zastosowanie twierdzenia Noether do lagrangianu (6.79) generuje następujące równania konstytutywne dla poszczególnych wielkości fizycznych:

— energia

$$\varepsilon = \frac{1}{2\omega} \nabla \chi \cdot (\kappa \nabla \chi + 2D \nabla \rho), \quad (6.82)$$

$$\mathbf{j}_\varepsilon = -\frac{1}{\omega} [D \nabla \chi \partial_t \rho + (\kappa \nabla \chi + D \nabla \rho) \partial_t \chi]. \quad (6.83)$$

Wykorzystując równania (6.69), (6.70), (6.80) i (6.81) możemy powyższe równania wyrazić poprzez prędkości \mathbf{u} i \mathbf{v} :

$$\varepsilon = \frac{1}{2} \frac{\rho^2}{\rho_0} (\mathbf{v}^2 - \mathbf{u}^2), \quad (6.84)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_\varepsilon &= \frac{\rho}{\rho_0} D [(\mathbf{v} - \mathbf{u}) \partial_t \rho + \mathbf{v} \nabla(\rho(\mathbf{v} - \mathbf{u}))] \\ &= \frac{\rho}{\rho_0} D [\mathbf{u} \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) - \mathbf{v} \operatorname{div}(\rho \mathbf{u})]. \end{aligned} \quad (6.85)$$

— pęd

$$\mathbf{p} = -\frac{\rho}{\omega} \nabla \chi, \quad (6.86)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} &= \frac{1}{\omega} (\rho \partial_i \chi - \frac{\kappa}{2} (\nabla \chi)^2 - D \nabla \rho \cdot \nabla \chi) \delta_{ij} + \\ &\quad \frac{1}{\omega} [\kappa \partial_i \chi \partial_j \chi + D(\partial_i \rho \partial_j \chi + \partial_i \chi \partial_j \rho)]. \end{aligned} \quad (6.87)$$

Powyższe równania również możemy wyrazić poprzez prędkości \mathbf{u} i \mathbf{v} :

$$\mathbf{p} = -\frac{\rho}{\omega} (\mathbf{v} - \mathbf{u}), \quad (6.88)$$

$$\sigma_{ij} = \frac{\rho}{\rho_0} \left\{ \left[\frac{D}{\rho} \operatorname{div}(\rho(\mathbf{v} - \mathbf{u})) - \frac{1}{2} (\mathbf{v}^2 - \mathbf{u}^2) \right] \delta_{ij} + v_i v_j - u_i u_j \right\}. \quad (6.89)$$

— masa

Aby otrzymać równanie zachowania masy, musimy przepisać lagrangian (6.79) w reprezentacji (ψ, ψ^*) , gdzie funkcja $\psi(t, x)$ o wartościach zespolonych, przez analogię do *pola wzbudzeń termicznych* nazywana *polem wzbudzeń dyfuzyjnych* [76], ma postać

$$\psi(t, x) = \sqrt{\rho(t, x)} e^{i\chi(t, x)}, \quad (6.90)$$

tak, że

$$\rho = \rho_0 \psi \psi^*, \quad (6.91)$$

$$\chi = -\frac{i}{2} \ln\left(\frac{\psi}{\psi^*}\right), \quad (6.92)$$

i

$$\mathcal{L} = \frac{i\rho_0}{2\omega} \left[D \left(\frac{\psi^*}{\psi} (\nabla\psi)^2 - \frac{\psi}{\psi^*} (\nabla\psi^*)^2 \right) + (\psi \partial_t \psi^* - \psi^* \partial_t \psi) \right] + \frac{\kappa}{8\omega} \left[\frac{1}{\psi^2} (\nabla\psi)^2 + \frac{2}{\psi\psi^*} \nabla\psi \nabla\psi^* + \frac{1}{\psi^{*2}} (\nabla\psi^*)^2 \right]. \quad (6.93)$$

Z twierdzenia Noether mamy

$$w = \frac{\Lambda\rho_0}{\omega} \psi \psi^*, \quad (6.94)$$

$$\mathbf{j}_w = \frac{\Lambda}{\omega} \left[\frac{i\kappa}{2} \left(\frac{1}{\psi} \nabla\psi - \frac{1}{\psi^*} \nabla\psi^* \right) - \rho_0 D(\psi \nabla\psi^* + \psi^* \nabla\psi) \right]. \quad (6.95)$$

Równania (6.94) i (6.95) w reprezentacji (ρ, χ) przyjmują postać

$$w = \frac{\Lambda}{\omega} \rho, \quad (6.96)$$

$$\mathbf{j}_w = -\frac{\Lambda}{\omega} (D \nabla\rho + \kappa \nabla\chi). \quad (6.97)$$

Wielkości te spełniają równanie zachowania wielkości typu masy (6.13), ponieważ podstawienie do niego równań (6.96) i (6.97) daje nam równanie dyfuzji (6.78), które z kolei, jak to pokazaliśmy na początku tego podrozdziału, jest równoważne równaniu zachowania masy (6.68).

6.5. Formalizm kanoniczny

W tym podrozdziale zostanie podjęta próba opisu procesów dyssypatywnych w ramach formalizmu kanonicznego dla mechaniki punktu materialnego na przykładzie oscylatora z tarciem i dla teorii pola na przykładzie równania przewodnictwa ciepła typu Cattaneo [79], [78]. Otrzymane wyniki ukazują trudności pojawiające się w tego typu podejściu.

6.5.1. Liniowy oscylator

Rozważmy klasyczny dwuwymiarowy oscylator bez tarcia o masie m i współczynniku sprężystości K , jednakowym dla obu kierunków ruchu [79].

Równania ruchu tego dynamicznego systemu mechanicznego mają znaną postać

$$m \ddot{x} + K x = 0, \quad m \ddot{y} + K y = 0. \quad (6.98)$$

Można je odtworzyć z następującego lagrangianu

$$\mathcal{L} = \frac{m}{2}(\dot{x}^2 + \dot{y}^2) - \frac{K}{2}(x^2 + y^2). \quad (6.99)$$

Zdefiniujmy teraz uogólnione współrzędne $q = (x, y)$ i uogólnione pędy zgodnie ze wzorem

$$p_q = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}}. \quad (6.100)$$

W tych oznaczeniach Hamiltonian

$$\mathcal{H} = p \dot{q} - \mathcal{L}, \quad (6.101)$$

otrzymany z lagrangianu (6.99) ma postać

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \frac{m}{2}(\dot{x}^2 + \dot{y}^2) + \frac{K}{2}(x^2 + y^2) \\ &= \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2) + \frac{K}{2}(x^2 + y^2). \end{aligned} \quad (6.102)$$

Równania kanoniczne

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_x} = \frac{1}{m} p_x, & \dot{p}_x &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x} = -K x, \\ \dot{y} &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_y} = \frac{1}{m} p_y, & \dot{p}_y &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial y} = -K y, \end{aligned} \quad (6.103)$$

są identyczne z równaniami Eulera-Lagrange'a. Te same równania można formalnie otrzymać również z innego lagrangianu

$$\mathcal{L} = m \dot{r} \dot{s} - K r s, \quad (6.104)$$

a wtedy

$$p_r = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}} = m \dot{s}, \quad p_s = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{s}} = m \dot{r}. \quad (6.105)$$

W reprezentacji prędkościowej Hamiltonian w tych zmiennych ma postać

$$\mathcal{H}(q, \dot{q}) = \dot{r} p_r + \dot{s} p_s - \mathcal{L} = m \dot{r} \dot{s} + K r s, \quad (6.106)$$

a w reprezentacji pędowej

$$\mathcal{H}(q, p) = \frac{1}{m} p_r p_s + K r s. \quad (6.107)$$

Równania kanoniczne, znalezione w zgodzie z równaniami (6.103) przyjmują postać

$$\begin{aligned} \dot{r} &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_r} = \frac{1}{m} p_s, & \dot{p}_r &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial s} = -K s, \\ \dot{s} &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_s} = \frac{1}{m} p_r, & \dot{p}_s &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial r} = -K r, \end{aligned} \quad (6.108)$$

i są identyczne z tymi otrzymanymi z lagrangianu. Zauważmy, że pędy otrzymane z lagrangianu (6.104) nie są równoległe do odpowiednich prędkości. lagrangian (6.99) ma ponadto dodatkową zaletę w porównaniu z lagrangianem (6.104), gdyż oprócz poprawnych równań kanonicznych sugeruje rozwiązanie przedstawionego poniżej zagadnienia oscylatora z tarciem

$$m \ddot{x} + R \dot{x} + K x = 0. \quad (6.109)$$

W trakcie ruchu układu konserwatywnego jego energia całkowita E pozostaje stała [98]. Tak więc, chcąc rozważać formalizm kanoniczny dla procesów dyssypatywnych, musimy zaproponować taki układ dynamiczny, w którym otoczenie uzyskuje dokładnie tyle samo energii co układ traci w trakcie dyssypatywnego procesu. W tym celu modelujemy „kąpiel termiczną” za pomocą innego oscylatora harmonicznego z antytarciem, a oba te oscylatory rozważamy równocześnie. lagrangian dla takiego układu jest już znany [76], [98] i ma postać

$$\mathcal{L} = m \dot{x} \dot{y} - \frac{1}{2} R (y \dot{x} - x \dot{y}) - K x y. \quad (6.110)$$

Równania Eulera-Lagrange'a otrzymane z tego lagrangianu mają postać

$$\begin{aligned} m \ddot{x} + R \dot{x} + K x &= 0, \\ m \ddot{y} - R \dot{y} + K y &= 0. \end{aligned} \quad (6.111)$$

Są to równania rozprzężone, z których pierwsze opisuje klasyczny oscylator z tarciem, ale pędy klasyczne już klasyczne nie są

$$p_x = m \dot{y} - \frac{1}{2} R y, \quad p_y = m \dot{x} - \frac{1}{2} R x, \quad (6.112)$$

czyli

$$\dot{x} = \frac{1}{m}(p_y - \frac{1}{2}R x), \quad \dot{y} = \frac{1}{m}(p_x - \frac{1}{2}R y). \quad (6.113)$$

W celu bardziej wyraźnego odróżnienia naszej propozycji od tej omówionej powyżej, wprowadzamy nową wielkość

$$\mathcal{K} = \sum_i p_i \dot{q}_i - \mathcal{L}, \quad (6.114)$$

którą nazywamy Khanianem. Khanian $\mathcal{K}(q, \dot{q})$ wygląda jak niedyssypatywny

$$\mathcal{K} = \mathcal{K}(q, \dot{q}) = m\dot{x}\dot{y} + K x y. \quad (6.115)$$

Jest to oczywiście tylko pozór, gdyż w reprezentacji pędowej

$$\mathcal{K} = \mathcal{K}(q, p) = \frac{1}{m}(p_x - \frac{1}{2}R y)(p_y + \frac{1}{2}R x) + K x y, \quad (6.116)$$

a równania kanoniczne przyjmują postać

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \frac{\partial \mathcal{K}}{\partial p_x} = \frac{1}{m}(p_y - \frac{1}{2}R x), \\ \dot{p}_x &= -\frac{\partial \mathcal{K}}{\partial x} = -\frac{1}{2m}R p_x + (K - \frac{R^2}{4m})y, \\ \dot{y} &= \frac{\partial \mathcal{K}}{\partial p_y} = \frac{1}{m}(p_x + \frac{1}{2}R y), \\ \dot{p}_y &= -\frac{\partial \mathcal{K}}{\partial y} = -\frac{1}{2m}R p_y + (K - \frac{R^2}{4m})x. \end{aligned} \quad (6.117)$$

6.5.2. Równanie przewodnictwa ciepła typu Cattaneo

Zakładamy, że ciało jest jednorodne i że zajmuje objętość V . Klasyczne równanie przewodnictwa ciepła ma postać prawa zachowania energii

$$\partial_t u + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0. \quad (6.118)$$

Niech gęstość energii $u(t, x)$ zależy liniowo tylko od temperatury bezwzględnej $T(t, x)$, a ciepło właściwe c niech będzie wielkością stałą

$$u = c T(t, x). \quad (6.119)$$

Ponadto, niech strumień energii \mathbf{j} zależy liniowo od gradientu pola temperatury, a tensor przewodnictwa ciepła $\hat{\lambda}$ niech będzie wielkością stałą

$$\mathbf{j} = -\hat{\lambda} \nabla T(t, x). \quad (6.120)$$

Przy tych założeniach równanie (6.118) przyjmuje postać równania Fouriera

$$c \partial_t T(t, x) - \nabla(\hat{\lambda} \nabla T(t, x)) = 0. \quad (6.121)$$

Rozwiązania równania Fouriera są niezgodne z prawami fizyki: ciepło propaguje się z nieskończoną prędkością. Wady tej nie ma równanie przewodnictwa ciepła typu Cattaneo, jeśli do równania Fouriera dodamy z prawej strony wielkość różną od zera typu jak poniżej

$$c \partial_t T(t, x) - \hat{\lambda} \Delta T(t, x) = \theta \partial_{tt} \varphi. \quad (6.122)$$

Formalizm kanoniczny dla równania Fouriera na analogiczną postać jak dla oscylatora harmonicznego i w zasadzie należałoby powtórzyć rozważania z poprzedniego podrozdziału. By tego uniknąć, potraktujemy równanie Cattaneo w ramach formalizmu Anthony'ego [16], [20], [76].

Jak pamiętamy, równanie Fouriera można otrzymać wykorzystując lagrangian (6.52). Dla równania Cattaneo należy ten lagrangian odpowiednio zmodyfikować i wtedy przyjmuje on postać [20]

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(T, \partial\varphi, \partial T) &= \frac{\alpha}{2} \left(\frac{m_T}{\alpha} (\partial_t T)^2 - 2\hat{\lambda} (\nabla T)^2 \right) \\ &+ \frac{1}{\omega} \left(cT \partial_t \tilde{\varphi} - \hat{\lambda} \nabla T \nabla \varphi \right) - \frac{\theta}{2\omega} (\partial_t \tilde{\varphi})^2, \end{aligned} \quad (6.123)$$

gdzie $\alpha = c \tau_R / (2\omega \theta)$, a $m_T = \alpha c \tau_R$. Tutaj τ_R – czas relaksacji strumienia ciepła, θ – pewien fenomenologiczny parametr, a

$$\tilde{\varphi}(t, \varphi, T) = \varphi - \left(\omega t + \frac{T_0}{2T} \right), \quad (6.124)$$

jest fazą równą zero w stanie lokalnej równowagi. Weźmy jako uogólnione współrzędne parę $\psi = (\tilde{\varphi}, T)$. Lagrangian (6.123) daje następujące równania Eulera-Lagrange'a

$$\begin{aligned} c \partial_t T - \hat{\lambda} \Delta T &= \theta \partial_{tt} \tilde{\varphi}, \\ c \partial_t \tilde{\varphi} + \hat{\lambda} \Delta \tilde{\varphi} &= m_T \partial_{tt} T - 2\alpha \hat{\lambda} \Delta T. \end{aligned} \quad (6.125)$$

Uogólnione pędy mają postać

$$\begin{aligned}\pi_1 &= \frac{1}{\omega} c T - \frac{\theta}{\omega} \partial_t \tilde{\varphi}, \\ \pi_2 &= m_T \partial_t T,\end{aligned}\tag{6.126}$$

skąd wynika, że

$$\begin{aligned}\partial_t \tilde{\varphi} &= \frac{\omega}{\theta} \left(\frac{1}{\omega} c T - \pi_1 \right), \\ \partial_t T &= \frac{\pi_2}{m_T}.\end{aligned}\tag{6.127}$$

Widać, że m_T gra tu rolę wielkości typu masy. Zauważmy, że teraz pędy są równoległe do odpowiednich prędkości. Khanian

$$\mathcal{K} = \pi_A \dot{\psi}^A - \mathcal{L},\tag{6.128}$$

dla równania przewodnictwa ciepła typu Cattaneo ma postać

$$\mathcal{K} = \frac{1}{2m_T} \pi_2^2 - \frac{\omega}{2\theta} \pi_1^2 + \frac{cT}{\theta} \pi_1 - \frac{(cT)^2}{2\omega\theta} + \hat{\lambda} \left(\alpha (\nabla T)^2 + \frac{1}{\omega} \nabla \tilde{\varphi} \nabla T \right).\tag{6.129}$$

Otrzymane stąd uogólnione prędkości są identyczne z równaniami (6.126), a równania dla uogólnionych pędów mają postać

$$\begin{aligned}\dot{\pi}_1 &= -\frac{\partial \mathcal{K}}{\partial \tilde{\varphi}} + \nabla \frac{\partial \mathcal{K}}{\partial (\nabla \tilde{\varphi})} = \frac{1}{\omega} \hat{\lambda} \Delta T, \\ \dot{\pi}_2 &= -\frac{\partial \mathcal{K}}{\partial T} + \nabla \frac{\partial \mathcal{K}}{\partial (\nabla T)} = -\frac{c}{\theta} \pi_1 + \frac{c^2 T}{\omega \theta} + 2\alpha \hat{\lambda} \Delta T + \frac{1}{\omega} \hat{\lambda} \Delta \tilde{\varphi},\end{aligned}\tag{6.130}$$

i odtwarzają dokładnie równania (6.125).

6.6. Lagrangian dla zjawiska termoelektryczności

Kolejnym przykładem zastosowania formalizmu Anthony'ego do zjawisk dyssypatywnych jest próba konstrukcji lagrangianu dla zjawiska termoelektryczności [77].

Równania Maxwella przyjmujemy tu w następującej postaci:

– magnetyczne prawo Gaussa

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (6.131)$$

– prawo Faradaya

$$\nabla \times \mathbf{E} + \partial_t \mathbf{B} = 0, \quad (6.132)$$

– elektryczne prawo Gaussa

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho, \quad (6.133)$$

– prawo Ampéra

$$\nabla \times \mathbf{B} - \partial_t \mathbf{E} = \mathbf{j}. \quad (6.134)$$

Elektromagnetyczne pola \mathbf{E} i \mathbf{B} można wyrazić przez potencjały elektromagnetyczne

$$(A^\mu) = (A^0, A^1, A^2, A^3), \quad \mu = 0, 1, 2, 3, \quad (6.135)$$

w następujący sposób:

$$B_i = \varepsilon_{ikl} \partial^k A^l, \quad E^i = \partial^i(A^\mu) = (A^0, A^1, A^2, A^3), \quad \mu = 0, 1, 2, 3. \quad (6.136)$$

Tutaj $(x^\mu = x^0, x^1, x^2, x^3)$, $x^0 = ct$, gdzie c jest prędkością światła. Przyjęcie metryki $(g_{\mu\nu})$ w postaci

$$(g_{\mu\nu}) = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (6.137)$$

pozwala na wprowadzenie kowariantnych współrzędnych i składowych wektorów

$$\begin{aligned} (x_\mu) &= (g_{\mu\nu}) = (-x_0, x_1, x_2, x_3), \\ \partial^\mu &= \left(\frac{\partial}{\partial x_\mu} \right) = \left(-\frac{\partial}{\partial x^0}, \frac{\partial}{\partial x^1}, \frac{\partial}{\partial x^2}, \frac{\partial}{\partial x^3} \right), \\ (A_\nu) &= (g_{\nu\mu} A^\mu) = (-A_0, A_1, A_2, A_3). \end{aligned} \quad (6.138)$$

Czterostrumień ma postać

$$(j^\nu) = (\rho, j^1, j^2, j^3), \quad (j_\nu) = (g_{\nu\mu}) = (-\rho, j_1, j_2, j_3). \quad (6.139)$$

W tej notacji lagrangian pola elektromagnetycznego ma postać – w próżni

$$\mathcal{L}_{em}^v(\partial A) = -\frac{1}{4} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} = -\frac{1}{4} g_{\kappa\mu} g_{\lambda\nu} F^{\mu\nu} F^{\kappa\lambda}, \quad (6.140)$$

– w ciele stałym

$$\mathcal{L}_{em}^s(A, \partial A) = -\frac{1}{4} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} + A^\mu j_\mu, \quad (6.141)$$

gdzie

$$F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu, \quad (6.142)$$

$$\partial^\mu A^\nu = \frac{\partial A^\nu}{\partial x_\mu}, \quad \partial^0 = \frac{\partial}{\partial x_0} = \frac{\partial}{c\partial t}, \quad (6.143)$$

czyli

$$(F^{\mu\nu}) = \begin{bmatrix} 0 & E^1 & E^2 & E^3 \\ -E^1 & 0 & B^3 & -B^2 \\ -E^2 & -B^3 & 0 & B^1 \\ -E^3 & B^2 & -B^1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (6.144)$$

Równania (6.131) i (6.132) dla potencjałów A^μ są spełnione tożsamościowo, ze względu na tożsamości

$$\operatorname{div} \operatorname{curl}(\cdot) \equiv 0, \quad \text{i} \quad \operatorname{curl} \operatorname{grad}(\cdot) \equiv 0. \quad (6.145)$$

6.6.1. Lagrangian oddziałujących pól

W teorii pola w celu opisanego oddziaływania elektronów z polem elektromagnetycznym stosuje się cechowanie

$$\partial_\mu \longrightarrow (\partial_\mu - ieA_\mu). \quad (6.146)$$

Podejście to generuje lagrangian o wartościach zespolonych, co przeczy naszemu wymaganiu, by lagrangian był rzeczywisty. Tu zaproponujemy inny

sposób włączenia w opis teoretyczny oddziaływania pól elektromagnetycznych i termicznych, postulując trzy formy lagrangianu. W poniższych wzorach używamy następujących oznaczeń: ψ – pole wzbudzeń termicznych (6.49), (6.50), φ – faza pola wzbudzeń termicznych, ξ – funkcja sprzężenia, $\hat{\sigma}$ – tensor przewodnictwa elektrycznego związany z prądem elektrycznym związkiem $\mathbf{j}_e = \hat{\sigma} \cdot \mathbf{E}$.

$$(WI) \quad \mathcal{L}_{int_1}(\psi, \partial A) = \xi \varphi \hat{\sigma} \cdot \mathbf{E} \otimes \mathbf{E}, \quad (6.147)$$

$$(WII) \quad \mathcal{L}_{int_2}(\psi, \partial A) = \xi T \hat{\sigma} \cdot \mathbf{E} \otimes \mathbf{E}, \quad (6.148)$$

$$(WIII) \quad \mathcal{L} = -c_w T \partial_t \varphi + \hat{\lambda} \cdot (\nabla T \otimes \nabla \varphi + \frac{T_0}{2T^2} \nabla T \otimes \nabla T) \\ + \frac{1}{2}(\mathbf{E}^2 - \mathbf{B}^2) + A^\mu j_\mu - \hat{\sigma} \cdot \mathbf{E} \otimes \mathbf{E} - \xi \varphi (\hat{\sigma} \cdot \mathbf{E}) \nabla T. \quad (6.149)$$

6.6.2. Równania Eulera-Lagrange'a

Policzmy teraz, jakie równania Eulera-Lagrange'a wynikają z postulowanych funkcyjonałów.

— (WI)

1. wariacja względem A^0 :

$$\operatorname{div} \mathbf{E} = \rho - 2\xi \hat{\sigma} \cdot (\nabla \otimes (\varphi \mathbf{E})); \quad (6.150)$$

2. wariacja względem \mathbf{A}

$$\operatorname{curl} \mathbf{B} - \partial_t \mathbf{E} = \mathbf{j} + 2\xi \hat{\sigma} \cdot \partial_t (\varphi \mathbf{E}); \quad (6.151)$$

3. wariacja względem φ

$$c_w \partial_t T - \hat{\lambda} \cdot (\nabla \otimes \nabla T) = \omega \xi \hat{\sigma} \cdot \mathbf{E} \otimes \mathbf{E}; \quad (6.152)$$

4. wariacja względem T

$$c_w \partial_t \varphi + \hat{\lambda} \cdot (\nabla \otimes \nabla \varphi) = \\ - c_w \omega - \hat{\lambda} \cdot \left(\frac{T_0}{T^2} \nabla \otimes \nabla T - \frac{T_0}{T^3} \nabla T \otimes \nabla T \right). \quad (6.153)$$

— (VII)

1. wariacja względem A^0 :

$$\operatorname{div} \mathbf{E} = \rho - 2\xi \hat{\sigma} \cdot (\nabla \otimes (T\mathbf{E})); \quad (6.154)$$

2. wariacja względem \mathbf{A}

$$\operatorname{curl} \mathbf{B} - \partial_t \mathbf{E} = \mathbf{j} + 2\xi \hat{\sigma} \cdot \partial_t (T\mathbf{E}); \quad (6.155)$$

3. wariacja względem φ

$$c_w \partial_t T - \hat{\lambda} \cdot (\nabla \otimes \nabla T) = 0; \quad (6.156)$$

4. wariacja względem T

$$\begin{aligned} c_w \partial_t \varphi + \hat{\lambda} \cdot (\nabla \otimes \nabla \varphi) = \\ - c_w \omega - \hat{\lambda} \cdot \left(\frac{T_0}{T^2} \nabla \otimes \nabla T - \frac{T_0}{T^3} \nabla T \otimes \nabla T \right) + \omega \xi \hat{\sigma} \cdot \mathbf{E} \otimes \mathbf{E}. \end{aligned} \quad (6.157)$$

— (VIII)

1. wariacja względem A^0 :

$$\mathbf{E} = \rho + 2\hat{\sigma} \cdot (\varphi \nabla \otimes \mathbf{E}) + \xi \hat{\sigma} \cdot \nabla \otimes (\varphi \nabla T); \quad (6.158)$$

2. wariacja względem \mathbf{A}

$$\operatorname{curl} \mathbf{B} - \partial_t \mathbf{E} = \mathbf{j} - 2\hat{\sigma} \partial_t (\varphi \mathbf{E}) - \xi \hat{\sigma} \cdot \partial_t (\varphi \nabla T); \quad (6.159)$$

3. wariacja względem φ

$$c_w \partial_t T - \hat{\lambda} \cdot (\nabla \otimes \nabla T) = \hat{\sigma} \cdot (\mathbf{E} \otimes (\mathbf{E} + \xi \nabla T)); \quad (6.160)$$

4. wariacja względem T

$$\begin{aligned} c_w \partial_t \varphi + \hat{\lambda} \cdot (\nabla \otimes \nabla \varphi) = \\ - c_w - \hat{\lambda} \cdot \left(\frac{T_0}{T^2} \nabla \otimes \nabla T - \frac{T_0}{T^3} \nabla T \otimes \nabla T \right) \\ + \xi \hat{\sigma} \cdot (\nabla \otimes (\varphi \mathbf{E})). \end{aligned} \quad (6.161)$$

Rozwiązanie równania (6.153) względem φ z wersji WI jest dobrze znane i ma postać (6.56), jednakże dla takiej postaci φ równanie (6.151) może być doprowadzone do znanej postaci tylko w przypadku $\mathbf{E} = 0$, co oczywiście jest niezgodne z oczekiwaniami.

W wersji WII rozwiązanie równania (6.157) ma postać różną od (6.56), gdyż równanie zawiera dodatkowe człony zawierające natężenie pola elektrycznego \mathbf{E} . Można to rozwiązanie doprowadzić do postaci (6.56) gdy $\mathbf{E} = \text{const}$. Przypadek ten jest jednakże nie interesujący.

Najbardziej obiecująca jest wersja WIII ze względu na równanie (6.160). Opisuje ono oczekiwany efekt, a mianowicie zjawisko Joule'a-Thomsona. Przypomnijmy, że prąd elektryczny $\mathbf{j}_e = \hat{\sigma} \cdot \mathbf{E}$ przepływając przez przewodnik w którym istnieje gradient temperatury, oprócz ciepła Joule'a $Q_J = \hat{\sigma} \cdot (\mathbf{E} \otimes \mathbf{E})$ powoduje emisję lub absorbcję ciepła Thomsona $Q_{Th} = \xi \mathbf{j}_e \cdot \nabla T$, gdzie ξ – współczynnik Thomsona.

Jeśli podejmuje się próbę opisu zjawisk sprzężonych, to lagrangian powinien składać się z części opisujących każde z tych zjawisk osobno (by nie zniknął w sytuacji nie występowania któregoś z rozważanych zjawisk) i z części sprzęgającej poszczególne zjawiska. W omawianym tu zjawisku termoelektrycznym składa się on z trzech części

$$\mathcal{L}(\psi, \partial\psi, A, \partial A) = \mathcal{L}_{th}(\psi, \partial\psi) + \mathcal{L}_{em}(A, \partial A) + \mathcal{L}_{int}(\psi, \partial A), \quad (6.162)$$

gdzie poszczególne składniki to $\mathcal{L}_{th}(\psi, \partial\psi)$ – lagrangian zjawiska przewodnictwa temperatury, $\mathcal{L}_{em}(A, \partial A)$ – lagrangian pola elektromagnetycznego, $\mathcal{L}_{int}(\psi, \partial A)$ – lagrangian oddziaływania. Właśnie taką strukturę ma zaproponowany tu lagrangian w wersji WIII. W rozdziale tym wykorzystano prace [75], [76], [77], [78], [79], [85].

Zakończenie

Przedstawione w prezentowanej pracy metody opisu zjawisk dyssypatywnych ukazują na wielość stosowanych teorii fizykalnych. Nie wyczerpują one oczywiście wszystkich możliwości, ale reprezentują tylko te zastosowane przez autora w jego badaniach. Metody te mają różną wagę. W zastosowaniach praktycznych na pewno bardzo ważną rolę odgrywają techniki, w których położono szczególny nacisk na pewne specyficzne cechy badanego układu fizycznego, jak w przytoczonych przykładach propagacji fal i ruchu dyslokacji w kryształach. Pozwalają one w szczególności ocenić zachowanie się poszczególnych badanych obiektów i zbudować urządzenia do konkretnych zastosowań (np. wykorzystując zjawisko Schocha do budowy detektorów defektów materiałowych) lub też tylko, jak w tym drugim przypadku, pozwalają przewidzieć zachowanie się materiałów w różnych temperaturach.

W rozdziale dotyczącym dyfuzji dokonano pogłębionej analizy tego zjawiska, tak ważnego w różnych obszarach i posiadającego cały szereg istotnych zastosowań praktycznych. Wnioski wynikające z tego podejścia otwierają nowe pola badawcze i zachęcają do dalszych poszukiwań.

Również do dalszych badań zachęcają rozdziały dotyczące w ogólności wariacyjnych metod opisu zjawisk fizycznych. Niezależnie od aspektów filozoficznych, czyli od dążenia do ujęcia w jednym formalizmie pełnego bogactwa zjawisk przyrody, mają one istotny aspekt praktyczny. Współczesne techniki numeryczne, wykorzystujące komputery najnowszych generacji, otwierają niespotykane dotąd możliwości obliczeniowe, gdzie poszukiwania funkcji minimalizujących dany funkcjonal są często skuteczniejsze niż poszukiwanie rozwiązań skomplikowanych nieliniowych równań różniczkowych.

Dodatek – Definicje i twierdzenie dotyczące wariacji użytych w opisie ośrodków mikropolarnych

A. Wariacje funkcji i funkcjonałów

A.1. Wariacje pochodnych

Z twierdzenia o wartości średniej wynika, że jeśli funkcje f i \bar{f} są funkcjami bliskimi (patrz Definicje 5.4, 5.5 i 5.6 na stronie 152) wtedy

$$\bar{f}(\bar{x}^\alpha) = f(\bar{x}^\alpha) + \varepsilon \delta_\varepsilon f(x^\alpha). \quad (\text{A.1})$$

Zauważmy, że transformacja $\mathcal{F} : \mathcal{F}(f) = \bar{f}$ jest homomorfizmem, to znaczy, że

$$\mathcal{F}(f_1 \cdot f_2) = \mathcal{F}(f_1) \cdot \mathcal{F}(f_2), \quad (\text{A.2})$$

i

$$\mathcal{F}(f_1 + f_2) = \mathcal{F}(f_1) + \mathcal{F}(f_2). \quad (\text{A.3})$$

Rzeczywiście,

$$\begin{aligned} \bar{f}_1(x^\alpha) \cdot \bar{f}_2(x^\beta) &= f_1(x^\alpha) \cdot f_2(x^\beta) + \\ &\varepsilon \left[f_{1\varepsilon}(x^\alpha) \cdot f_2(x^\beta) + f_1(x^\alpha) \cdot f_{2\varepsilon}(x^\beta) + \varepsilon f_{1\varepsilon}(x^\alpha) \cdot f_{2\varepsilon}(x^\beta) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Druga właściwość jest oczywista.

Zaobserwujmy, że funkcje $\bar{f}_1 \cdot \bar{f}_2$ i $f_1 \cdot f_2$ są funkcjami bliskimi i że

$$\partial(f_1 \cdot f_2) = \partial f_1 \cdot f_2 + f_1 \cdot \partial f_2. \quad (\text{A.5})$$

Po zastosowaniu twierdzenia o wartości średniej do iloczynu $\bar{f}_1(\bar{x}^\alpha) \cdot \bar{f}_2(\bar{x}^\beta)$ otrzymuje się, że

$$\delta(f_1 \cdot f_2) = \delta f_1 \cdot f_2 + f_1 \cdot \delta f_2. \quad (\text{A.6})$$

zwróćmy uwagę, że $\frac{\partial \bar{f}(x^\alpha)}{\partial x^\gamma}$ i $\frac{\partial f(x^\alpha)}{\partial x^\gamma}$ są również funkcjami bliskimi, a ponadto

$$\partial(f, \alpha) = (\partial f)_{, \alpha} , \quad (\text{A.7})$$

i

$$\delta(f, \alpha) = (\delta f)_{, \alpha} - f_{, \beta} (\delta x^\beta)_{, \alpha} . \quad (\text{A.8})$$

Z równania (A.8) i z (5.45) otrzymujemy równania wariacji pochodnej materialnej dowolnej funkcji $f(\mathbf{x}, t)$

$$\delta \dot{f} = \frac{D(\delta f)}{Dt} - \dot{f} \frac{D(\delta t)}{Dt} . \quad (\text{A.9})$$

A.2. Wariacje całek

Twierdzenie A 1.1

Niech będą dane całki

$$\mathcal{I}(x^\alpha) = \int_A f(x^\alpha) dv dt , \quad \text{i} \quad \bar{\mathcal{I}}(\bar{x}^\alpha) = \int_{\bar{A}} \bar{f}(\bar{x}^\alpha) d\bar{v} d\bar{t} ,$$

gdzie dv jest elementem objętości w \mathbb{R}^4 a funkcje $f(x^\alpha)$ i $\bar{f}(\bar{x}^\alpha)$ są funkcjami bliskimi (patrz Definicja 5.4 na stronie 152). W tym przypadku funkcjonały \mathcal{I} i $\bar{\mathcal{I}}$ są również bliskie, i równocześnie i

$$\partial \mathcal{I}(x^\alpha) = \int_A \partial f(x^\alpha) dv dt ,$$

i

$$\delta \mathcal{I}(x^\alpha) = \int_A [\delta f(x^\alpha) + f(x^\alpha) (\delta x^\beta)_{, \beta}] dv dt . \quad (\text{A.10})$$

Dowód.

Zauważmy, że

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{I}}(\bar{x}^\alpha) &= \int_A [f(x^\alpha) + \varepsilon \delta_\varepsilon f(x^\alpha)] \det \left(\frac{\partial \bar{x}^\gamma}{\partial x^\beta} \right) dv dt \\ &= \int_A [f(x^\alpha) + \varepsilon \delta_\varepsilon f(x^\alpha)] \det [\delta_\beta^\gamma + \varepsilon (\delta_\varepsilon x^\gamma)_{, \beta}] dv dt \\ &= \int_A f(x^\alpha) dv dt + \varepsilon \int_A [\delta_\varepsilon f(x^\alpha) + f(x^\alpha) (\delta_\varepsilon x^\beta)_{, \beta} + \varepsilon r_\varepsilon] dv dt , \end{aligned}$$

gdzie $\varepsilon r_\varepsilon$ jest funkcją rzędu ε^2 i może być pominięta w dalszych rozważaniach, ponieważ $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon r_\varepsilon = 0$. W tym przypadku

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \mathcal{I}_\varepsilon &= \int_A \left[\delta f(x^\alpha) + f(x^\alpha) (\delta x^\beta)_{,\beta} \right] dv dt \\ &= \int_A \left[\partial f(x^\alpha) + (f(x^\alpha) \delta x^\beta)_{,\beta} \right] dv dt . \end{aligned}$$

B. Wariacje obiektów bezwładnych i deformacji

Teraz znajdziemy wariacje niezależnych zmiennych konstytutywnych dla ciekłych kryształów w stanie równowagi termodynamicznej, czyli dla [44]:

$$\rho^{-1}, \mathbf{j}, \boldsymbol{\gamma}, T, \boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{B} .$$

Z równania (5.44) i z prawa zachowania masy (5.3), gdzie $\rho_o(\mathbf{X})$ jest gęstością niezdeformowanego ciała, i z faktu że wariacja gęstości niezdeformowanego ciała znika, a więc $\delta \rho_o = 0$, wynika, że

$$\delta \rho = -\rho [(\delta x^k)_{,k} - v^k (\delta t)_{,k}] , \quad (\text{B.1})$$

i

$$\delta \rho^{-1} = -\rho^{-1} [(\delta x^k)_{,k} - v^k (\delta t)_{,k}] . \quad (\text{B.2})$$

Wariacja j_{kl} wynika z (5.4) i z (5.50):

$$\delta j_{kl} = -j_k^m \delta_a \kappa_{lm} - j_l^m \delta_a \kappa_{km} , \quad (\text{B.3})$$

ponieważ $\delta \mathfrak{J}^{KL} = 0$. Zauważmy, że

$$\delta_a \kappa_{km} = -\delta_a \kappa_{mk} . \quad (\text{B.4})$$

Wariacja przestrzennego tensora giętno-skrętnego ma postać

$$\begin{aligned} \delta \gamma_{kl} &= -\gamma_{km} (\delta x^m)_{,l} + (\gamma_{kn} v^n - \nu_k) (\delta t)_{,l} \\ &\quad + \frac{1}{2} \varepsilon_{kmn} (\delta_a \kappa^{mn})_{,l} + \gamma_l^m \delta_a \kappa_{mk} . \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Rzeczywiście,

$$\begin{aligned}\delta\gamma_{kl} &= \frac{1}{2}\varepsilon_{kmn} [\chi^{mK} \delta(\chi^n_{K,l}) + (\delta\chi^{mK}) \chi^n_{K,l}] \\ &= \frac{1}{2}\varepsilon_{kmn} \{ \chi^{mK} [(\delta\chi^n_K)_{,l} - \chi^n_{K,\alpha} (\delta x^\alpha)_{,l}] + (\delta\chi^{mK}) \chi^n_{K,l} \}.\end{aligned}\tag{B.6}$$

Wiadomo, że

$$\delta\chi^{mK} = \chi^{rK} \delta_a \kappa_r^m,\tag{B.7}$$

$$\chi^{rK} \chi^s_{K,l} = \varepsilon^{krs} \gamma_{kl},\tag{B.8}$$

i

$$\varepsilon^{krs} \varepsilon_{kmn} = \delta_m^r \delta_n^s - \delta_n^r \delta_m^s.\tag{B.9}$$

Wynika stąd, że

$$\begin{aligned}\delta\gamma_{kl} &= -\gamma_{kr} (\delta x^r)_{,l} - \frac{1}{2}\varepsilon_{kmn} \chi^{mK} (\dot{\chi}^n_K - v^r \chi^n_{K,r}) (\delta t)_{,l} \\ &\quad + \frac{1}{2}\varepsilon_{kmn} [(\delta_a \kappa^{mn})_{,l} + 2\varepsilon^{imr} \gamma_{il} \delta_a \kappa_r^n].\end{aligned}\tag{B.10}$$

Uwzględniając równania (5.20), (5.21) i

$$\dot{\chi}^k_K = {}_a\nu^k_l \chi^l_K,\tag{B.11}$$

otrzymujemy ostatecznie równanie (B.5).

Podobnie można otrzymać wyrażenie na wariację materialnego tensora giętno-skrętnego

$$\delta\Gamma_{KL} = x^k_{,L} \chi_{lK} \left[(\check{\delta}\kappa^l)_{,k} + b^l_k \delta t \right],\tag{B.12}$$

i na wariację tensora deformacji Cosserat

$$\begin{aligned}\delta\mathfrak{C}_{KL} &= \left[(\delta x^k)_{,l} - v^k (\delta t)_{,l} \right] x^l_{,K} \chi_{kL} + x^k_{,K} \chi^m_L \delta_a \kappa_{mk} \\ &= x^k_{,K} \left[\chi_{lL} (\check{\delta}x^l)_{,k} + \chi^n_L \varepsilon_{lnk} \check{\delta}\kappa^l + \chi^l_L a_{kl} \delta t \right].\end{aligned}\tag{B.13}$$

C. Wariacje prędkości

W tym podrozdziale podamy wyrażenie na wariacje wektora prędkości kątowej $\boldsymbol{\nu}$.

Zauważmy, że wariacja tensora gyriacji ${}_d\nu_{kl}$ jest równa wyrażeniu

$$\begin{aligned}\delta{}_d\nu_{kl} &= \delta(\dot{\chi}_{kK} \chi_l^K) \\ &= \frac{D}{Dt}(\delta{}_d\kappa_{lk}) - {}_d\nu_{kl} \frac{D(\delta t)}{Dt} + {}_d\nu_l^m \delta{}_d\kappa_{km} + {}_d\nu_k^m \delta{}_d\kappa_{ml}.\end{aligned}\quad (\text{C.1})$$

Stąd wynika już bezpośrednio wariacja wektora prędkości kątowej

$$\begin{aligned}\delta\nu_m &= -\frac{1}{2}\varepsilon_{mkl} \delta{}_d\nu^{kl} \\ &= -\nu_m \frac{D(\delta t)}{Dt} + \frac{1}{2}\varepsilon_{mkl} \frac{D(\delta{}_d\kappa^{kl})}{Dt} + \nu^k \delta{}_d\kappa_{km}.\end{aligned}\quad (\text{C.2})$$

Wariacja wektora gęstości spinu $\boldsymbol{\sigma}$ może być łatwo otrzymana z równań (B.3) i (C.2). Zgodnie z wynikami Eringena [46]

$$\sigma_k = j^{kl} \nu_l, \quad (\text{C.3})$$

i wariacja σ_k ma postać

$$\delta\sigma_k = -\sigma_k \frac{D(\delta t)}{Dt} + \frac{1}{2}\varepsilon^{mnl} j_{km} \frac{D(\delta{}_d\kappa_{nl})}{Dt} - \sigma^l \delta{}_d\kappa_{kl}. \quad (\text{C.4})$$

D. Wariacje pól zewnętrznych

W tym podrozdziale znajdziemy wariacje pola temperatury $T = T(x, t)$, wektora natężenia pola elektrycznego $\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}(x, t)$ i wektora indukcji magnetycznej $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{B}(x, t)$. Zgodnie z równaniem (A.9), wariacja temperatury ma postać następującą:

$$\delta T = \frac{D\delta\Theta}{Dt} - T \frac{D\delta t}{Dt}. \quad (\text{D.5})$$

Zgodnie z równaniem (A.8)

$$\delta(\Theta_{,k}) = (\delta\Theta)_{,k} - \Theta_{,l} (\delta x^l)_{,k} - (T - v^l \Theta_{,l}) (\delta t)_{,k}, \quad (\text{D.6})$$

and

$$\delta(\Theta_{,K}) = (\delta\Theta)_{,K} - T(\delta t)_{,K}. \quad (\text{D.7})$$

Wariacje wektorów \mathbf{E} and \mathbf{B} mają następującą postać:

$$\begin{aligned} \delta E_l &= -(\delta A_l)_{,t} + A_{l,k} (\delta x^k)_{,t} + A_{k,t} (\delta t)_{,t} \\ &\quad + (\delta \varphi)_{,l} - \varphi_{,k} (\delta x^k)_{,l} - \varphi_{,t} (\delta t)_{,l} . \end{aligned} \quad (\text{D.8})$$

$$\delta B^k = \varepsilon^{kmn} \left[(\delta A_n)_{,m} - A_{n,l} (\delta x^l)_{,m} - A_{n,t} (\delta t)_{,m} \right] . \quad (\text{D.9})$$

E. Wariacje lokalne i niezmiennicze względem cechowania

Transformację

$$\hat{A}_k = A_k + \Psi_{,k} , \quad \hat{\varphi} = \varphi + \frac{\partial \Psi}{\partial t} , \quad (\text{E.1})$$

gdzie Ψ – dowolna funkcja skalarna, nazywamy transformacją cechowania [152], ponieważ zachowuje ona postać równań Maxwella – mają one taką samą postać również w reprezentacji

$$E_l = -\frac{\partial \hat{A}_l}{\partial t} + \hat{\varphi}_{,l} , \quad B^k = \varepsilon^{kmn} \hat{A}_{n,m} . \quad (\text{E.2})$$

Równania (D.8) i (D.9) wyrażone przez niezmiennicze względem cechowania wariacje Weissa (5.55) przyjmują następującą postać:

$$\begin{aligned} \delta E_l &= (\hat{\delta} \varphi)_{,l} - \frac{D}{Dt} (\hat{\delta} A_l) + v^k (\hat{\delta} A_l)_{,k} \\ &\quad + \varepsilon_{mkl} B^m \left[\frac{D(\delta x^k)}{Dt} - v^n (\delta x^k)_{,n} \right] \\ &\quad - E_l \left[\frac{D(\delta t)}{Dt} - v^k (\delta t)_{,k} \right] - E_k (\delta x^k)_{,l} . \end{aligned} \quad (\text{E.3})$$

$$\delta B^m = \varepsilon^{mkl} \left[(\hat{\delta} A_l)_{,k} + E_l (\delta t)_{,k} \right] + B^k (\delta x^m)_{,k} - B^m (\delta x^k)_{,k} . \quad (\text{E.4})$$

Wariacja wektora \mathbf{E} ma postać:

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{E}_l &= (\hat{\delta} \varphi)_{,l} - \frac{D}{Dt} (\hat{\delta} A_l) + v^k (\hat{\delta} A_k)_{,l} \\ &\quad - \mathcal{E}_l \frac{D(\delta t)}{Dt} - v^m \mathcal{E}_m (\delta t)_{,l} - \mathcal{E}_k (\delta x^k)_{,l} . \end{aligned} \quad (\text{E.5})$$

Jeśli wprowadzimy potencjał skalarny ϕ

$$\phi \equiv \varphi + \mathbf{v} \cdot \mathbf{A}, \quad (\text{E.6})$$

to jego transformacja cechowania przyjmuje postać

$$\hat{\phi} = \phi + \dot{\Psi}. \quad (\text{E.7})$$

Widać, że

$$\hat{\phi} = \hat{\varphi} + \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{A}}. \quad (\text{E.8})$$

W tym przypadku mamy

$$\mathcal{E}_k = -(\dot{A}_k + v^m{}_{,k} A_m) + \phi_{,k} = -\left[\frac{D}{Dt}(\hat{A}_k) + v^m{}_{,k} \hat{A}_m\right] + \hat{\phi}_{,k}. \quad (\text{E.9})$$

Można sprawdzić, że niezmiennicza względem cechowania wariacja ϕ ma postać

$$\hat{\delta}\phi \equiv \hat{\delta}\varphi + \mathbf{v} \cdot \hat{\delta}\mathbf{A}. \quad (\text{E.10})$$

Niech $\phi = \dot{\Psi}$ i $\boldsymbol{\zeta} \equiv -\mathbf{A} + \nabla\Psi$. Wtedy

$$\mathcal{E}_k = \dot{\zeta}_k + v^l{}_{,k} \zeta_l, \quad \mathcal{E}_K = \dot{\zeta}_K, \quad (\text{E.11})$$

where

$$\mathcal{E}_K \equiv x^k{}_{,K} \mathcal{E}_k, \quad \zeta_K \equiv x^k{}_{,K} \zeta_k. \quad (\text{E.12})$$

Moreover

$$\delta\mathcal{E}_K = \frac{D(\delta\zeta_K)}{Dt} - \mathcal{E}_K \frac{D(\delta t)}{Dt}, \quad (\text{E.13})$$

gdzie

$$\delta\zeta_K = -x^k{}_{,K} \left[\hat{\delta}A_k - (\delta\Psi - \mathbf{A} \cdot \check{\delta}\mathbf{x} - \phi \delta t)_{,k} \right], \quad (\text{E.14})$$

$$\hat{\delta}\phi = \frac{D}{Dt} (\delta\Psi - \mathbf{A} \cdot \check{\delta}\mathbf{x} - \phi \delta t). \quad (\text{E.15})$$

Wariacje niezależnych zmiennych konstytutywnych ciekłych kryształów można teraz następująco wyrazić poprzez wariacje niezmiennicze względem cechowania $\hat{\delta}$ i wariacje lokalne $\check{\delta}$

$$\delta\rho^{-1} = \rho^{-1} \left[(\check{\delta}x^k)_{,k} + v^k{}_{,k} \delta t \right], \quad (\text{E.16})$$

$$\delta j_{mn} = -(\varepsilon_{lnr} j_m^r + \varepsilon_{lmr} j_n^r)(\check{\delta}\kappa^l + \nu^l \delta t), \quad (\text{E.17})$$

$$\begin{aligned} \delta \gamma^m_k &= -\gamma^m_l (\check{\delta}x^l)_{,k} + (\check{\delta}\kappa^m)_{,k} + \varepsilon^m_{ln} \gamma^n_k \check{\delta}\kappa^l \\ &+ (b^m_k - \gamma^m_n v^n_{,k} + \gamma^n_k v^m_n) \delta t, \end{aligned} \quad (\text{E.18})$$

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{E}_k &= -\mathcal{E}_l (\check{\delta}x^l)_{,k} - \frac{D(\hat{\delta}A_k)}{Dt} - v^l_{,k} \hat{\delta}A_l \\ &+ (\hat{\delta}\phi)_{,k} - \mathcal{E}_k \frac{D(\delta t)}{Dt} - \mathcal{E}_l v^l_{,k} \delta t, \end{aligned} \quad (\text{E.19})$$

$$\begin{aligned} \delta B^m &= B^k (\check{\delta}x^m)_{,k} - B^m (\check{\delta}x^k)_{,k} + \varepsilon^{klm} (\hat{\delta}A_l)_{,k} \\ &+ \varepsilon^{klm} \mathcal{E}_l (\delta t)_{,k} + (B^k v^m_{,k} - B^m v^k_{,k}) \delta t. \end{aligned} \quad (\text{E.20})$$

mamy ponadto, że

$$\delta \rho = -\rho [(\check{\delta}x^k)_{,k} + v^k_{,k} \delta t], \quad (\text{E.21})$$

$$\delta v^k = \frac{D(\check{\delta}x^k)}{Dt} + \dot{v}^k \delta t, \quad (\text{E.22})$$

$$\delta \nu^l = \frac{D(\check{\delta}\kappa^l)}{Dt} - \varepsilon^l_{mn} \nu^m \check{\delta}\kappa^n + \dot{\nu}^l \delta t, \quad (\text{E.23})$$

$$\delta \sigma^k = j^k_l \frac{D(\check{\delta}\kappa^l)}{Dt} + \varepsilon^k_{lm} \sigma^m \check{\delta}\kappa^l + \dot{\sigma}^k \delta t, \quad (\text{E.24})$$

$$\begin{aligned} \delta E_k &= -\varepsilon_{klm} B^m \frac{\partial(\check{\delta}x^l)}{\partial t} - E_l (\check{\delta}x^l)_{,k} - \frac{\partial(\hat{\delta}A_k)}{\partial t} - (v^l \hat{\delta}A_l)_{,k} \\ &+ (\hat{\delta}\phi)_{,k} - \mathcal{E}_k \frac{\partial(\delta t)}{\partial t} - E_l (v^l \delta t)_{,k} - \varepsilon_{klm} B^m \frac{\partial v^l}{\partial t} \delta t. \end{aligned} \quad (\text{E.25})$$

F. Wariacja energii

Energia swobodna ciekłych kryształów zależy od sześciu zmiennych polowych

$$\psi = \psi(\rho^{-1}, \mathbf{j}, \boldsymbol{\gamma}, T, \boldsymbol{\mathcal{E}}, \mathbf{B}). \quad (\text{F.1})$$

Z Twierdzenia 5.1 na stronie 153 wynika, że

$$\delta \psi = \frac{\partial \psi}{\partial \rho^{-1}} \delta \rho^{-1} + \frac{\partial \psi}{\partial j_{kl}} \delta j_{kl} + \frac{\partial \psi}{\partial \gamma_{kl}} \delta \gamma_{kl} + \frac{\partial \psi}{\partial T} \delta T + \frac{\partial \psi}{\partial \mathcal{E}_k} \delta \mathcal{E}_k + \frac{\partial \psi}{\partial B^k} \delta B^k. \quad (\text{F.2})$$

Po zastosowaniu wzorów na zmienne konstytutywne otrzymuje się

$$\begin{aligned}
\delta\psi = & -\frac{\partial\psi}{\partial\mathcal{E}_l} \frac{D(\hat{\delta}A_l)}{Dt} - \frac{\partial\psi}{\partial\mathcal{E}_k} \mathcal{E}_k \frac{D(\delta t)}{Dt} + \left(\rho^{-1} \frac{\partial\psi}{\partial\rho^{-1}} \delta_l^k \right. \\
& \left. - \frac{\partial\psi}{\partial\gamma_{mk}} \gamma_{ml} - \frac{\partial\psi}{\partial\mathcal{E}_k} \mathcal{E}_l + \frac{\partial\psi}{\partial B^l} B^k - \frac{\partial\psi}{\partial B^m} B^m \delta_l^k \right) (\delta x^l)_{,k} \\
& + \frac{1}{2} \varepsilon^{lmn} \frac{\partial\psi}{\partial\gamma^l_k} (\delta_{\text{d}}\kappa_{mn})_{,k} + \frac{\partial\psi}{\partial T} \left[\frac{D(\delta\Theta)}{Dt} - T \frac{D(\delta t)}{Dt} \right] \\
& + \left[\frac{\partial\psi}{\partial\mathcal{E}_k} v^l + \varepsilon^{mkl} \frac{\partial\psi}{\partial B^m} \right] (\hat{\delta}A_l)_{,k} + \frac{\partial\psi}{\partial\mathcal{E}_k} (\hat{\delta}\varphi)_{,k} \\
& - \left[\left(\rho^{-1} \frac{\partial\psi}{\partial\rho^{-1}} \delta_l^k - \frac{\partial\psi}{\partial\gamma_{mk}} \gamma_{ml} - \frac{\partial\psi}{\partial\mathcal{E}_k} \mathcal{E}_l \right) v^l \right. \\
& \left. + \frac{\partial\psi}{\partial\gamma^l_k} \nu^l - \varepsilon^{klm} \frac{\partial\psi}{\partial B^m} E_l \right] (\delta t)_{,k} \\
& + \left[-\frac{\partial\psi}{\partial j_{km}} j_k^n - \frac{\partial\psi}{\partial j_{mk}} j^n_k + \frac{\partial\psi}{\partial\gamma_{nk}} \gamma^m_k \right] \delta_{\text{d}}\kappa_{mn}.
\end{aligned} \tag{F.3}$$

Aksjomat obiektywności materiałowej [44], [46] narzuca, aby

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial\psi}{\partial j_{mk}} j_k^n + \frac{\partial\psi}{\partial j_{km}} j_k^n + \frac{\partial\psi}{\partial\gamma_{mk}} \gamma^n_k + \frac{\partial\psi}{\partial\gamma_{km}} \gamma_k^n + \frac{\partial\psi}{\partial\mathcal{E}_m} \mathcal{E}^n + \frac{\partial\psi}{\partial B_m} B^n \\
& = \frac{\partial\psi}{\partial j_{nk}} j^m_k + \frac{\partial\psi}{\partial j_{kn}} j_k^m + \frac{\partial\psi}{\partial\gamma_{nk}} \gamma^m_k + \frac{\partial\psi}{\partial\gamma_{kn}} \gamma^k_m + \frac{\partial\psi}{\partial\mathcal{E}_n} \mathcal{E}^m + \frac{\partial\psi}{\partial B_n} B^m.
\end{aligned} \tag{F.4}$$

Uwzględniając fakt, że $\delta_{\text{d}}\kappa_{mn} = -\delta_{\text{d}}\kappa_{nm}$ otrzymujemy

$$\begin{aligned}
& \left[\frac{\partial\psi}{\partial j_{mk}} j_k^n + \frac{\partial\psi}{\partial j_{km}} j_k^n + \frac{\partial\psi}{\partial\gamma_{mk}} \gamma^n_k + \frac{\partial\psi}{\partial\gamma_{km}} \gamma_k^n \right. \\
& \left. + \frac{\partial\psi}{\partial\mathcal{E}_m} \mathcal{E}^n + \frac{\partial\psi}{\partial B_m} B^n \right] \delta_{\text{d}}\kappa_{mn} = 0.
\end{aligned} \tag{F.5}$$

Można pokazać, że wyrażenie w ostatnich nawiasach wzoru (F.3) wynosi

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{\partial\psi}{\partial j_{km}} j_k^n - \frac{\partial\psi}{\partial j_{mk}} j_k^n + \frac{\partial\psi}{\partial \gamma_{nk}} \gamma_k^m \right] \delta_{\text{d}} \kappa_{mn} \\ &= \left[\frac{\partial\psi}{\partial \gamma_{mk}} \gamma_{ml} + \frac{\partial\psi}{\partial \mathcal{E}_k} \mathcal{E}_l - \frac{\partial\psi}{\partial B^l} B^k \right] \delta_{\text{d}} \kappa_k^l. \end{aligned} \quad (\text{F.6})$$

Biorąc pod uwagę w (F.3) zależność (F.6), i że

$${}_{\text{d}}\nu_{rl} \nu^l = 0, \quad (\text{F.7})$$

otrzymujemy

$$\begin{aligned} \delta\psi &= \frac{D}{Dt} \left[\frac{\partial\psi}{\partial T} (\delta\Theta - T \delta t) - \frac{\partial\psi}{\partial \mathcal{E}_l} \hat{\delta} A_l - \frac{\partial\psi}{\partial \mathcal{E}_k} \mathcal{E}_k \delta t \right] \\ &+ \left[\rho^{-1} \frac{\partial\psi}{\partial \rho^{-1}} \delta_l^k - \frac{\partial\psi}{\partial \gamma_k^m} \gamma_{ml} - \frac{\partial\psi}{\partial \mathcal{E}_k} \mathcal{E}_l + \frac{\partial\psi}{\partial B^l} B^k - \frac{\partial\psi}{\partial B^m} B^m \delta_l^k \right] \\ &\times [(\check{\delta} x^l)_{,k} - \varepsilon_k^{ln} \check{\delta} \kappa_n + a_k^l \delta t] \\ &+ \frac{\partial\psi}{\partial \gamma_k^l} [(\check{\delta} \kappa^l)_{,k} + b_k^l \delta t] - \frac{D}{DT} \left(\frac{\partial\psi}{\partial T} \right) \delta\Theta \\ &+ \varepsilon^{klm} \frac{\partial\psi}{\partial B^m} (\hat{\delta} A_l)_{,k} + \left[\frac{D}{Dt} \left(\frac{\partial\psi}{\partial \mathcal{E}_l} \right) - \frac{\partial\psi}{\partial \mathcal{E}_k} v^l{}_{,k} \right] \hat{\delta} A_l + \frac{\partial\psi}{\partial \mathcal{E}_k} (\hat{\delta} \phi)_{,k} \\ &+ \varepsilon^{klm} \frac{\partial e}{\partial B^m} \mathcal{E}_l (\delta t)_{,k} + \frac{D}{Dt} \left(\frac{\partial\psi}{\partial T} T + \frac{\partial e}{\partial \mathcal{E}_k} \mathcal{E}_k \right) \delta t. \end{aligned} \quad (\text{F.8})$$

Bibliografia

- [1] *Słownik łacińsko-polski*. Wydawnictwo Tadeusza Radjusza Gutenberg - Print, Warszawa, 1996.
- [2] L. Adler. Selected problems in quantitative nondestructive evaluation. Z. Pawłowski, J.K. Zieniuk, redaktorzy, *Proceedings of the Second Congress of the Federation of Acoustical Societies of Europe FASE-78*, wolumen I, strony 163–166, Warszawa, 18-22 September 1978.
- [3] V.I. Alshits. Phononnyj veter i tormozhenije dislokaczij. *Fizika Twierdowo Tielu*, 11:2405, 1969. (ros.).
- [4] V.I. Alshits. The phonon-dislocation interaction and its role in dislocation dragging and thermal resistivity. J. Lothe V.L. Indenbom, redaktor, *Elastic strain fields and dislocation mobility*, strony 625–697, Amsterdam, 1992. North Holland.
- [5] V.I. Alshits, A.N. Darinskii, R.K. Kotowski, A.L. Shuvalov. Analog efekta Shoha pri otrazhenii akusticheskikh putzkov ot svobodnoj granicy kristalla. *Kristallografija*, 33:541–553, 1988. (ros.).
- [6] V.I. Alshits, W. Gierulski, V.N. Liubimov, A. Radowicz. Resonant excitation of quasi-Rayleigh waves in layers on soft and hard substrates. *Kristallografija*, 42(1):26–33, 1997. (ros.).
- [7] V.I. Alshits, A.S. Gorkunova, V.N. Liubimov, R.K. Kotowski. Uprugije volny v anizotropnoj strukture sloj na podkladkie. II. Slutsaj poperetnoej izotropii. *Kristallografija*, 44(5):858–864, 1999. (ros.).
- [8] V.I. Alshits, A.S. Gorkunova, V.N. Liubimov, J.P. Nowacki. Uprugije volny v anizotropnoj strukture sloj na podkladkie. I. Obstzaja teorija. *Kristallografija*, 44(4):639–649, 1999. (ros.).
- [9] V.I. Alshits, V.L. Indenbom. Dinamitcheskoe tormozhenije dislokaczij. *Usp. Fiz. Nauk*, 115:3–39, 1975. (ros.).
- [10] V.I. Alshits, V.L. Indenbom. Mechanisms of dislocation drag. w: F.R.N. Nabarro, redaktor, *Dislocations in solids*, wolumen 7, strony 43–111, Amsterdam, 1986. North-Holland Physics Publishing.

- [11] V.I. Alshits, R. Kotowski. Phonon drag of the prismatic dislocation loops. *Phys. Stat. Sol. (b)*, 68:K171–K174, 1975.
- [12] V.I. Alshits, E. Lote. O poverhnostnyh volnah v geksgonalnyh kristallah. *Kristallografija*, 23(5):901–913, 1978. (ros.).
- [13] V.I. Alshits, J. Lothe. Comments on the relation between surface wave theory and the theory of reflection. *Wave Motion*, 3:297–310, 1981.
- [14] V.I. Alshits, M.D. Mitlianskij, R. Kotowski. The phonon wind as a non-linear mechanism of dislocation dragging. *Arch. Mech.*, 31:91–105, 1979.
- [15] K.H. Anthony. w: Continuum theory of liquid crystals. *Continuum Models of Discrete Systems*, strony 761–803, Freudenstadt, Germany, June 24–30 1980. University of Waterloo Press.
- [16] K.H. Anthony. A new approach describing irreversible processes. w: O. Brulin, R.K.T. Hsieh, redaktorzy, *Models of Discrete Systems 4*. North-Holland Publishing Company, 1981.
- [17] K.H. Anthony. A new approach to thermodynamics of irreversible processes by means of Lagrange formalism. w: C.W. Kilimster, redaktor, *Dis-equilibrium and self-organization*, strony 75–92. D. Reidel Publ. Comp., 1986.
- [18] K.H. Anthony. Entropy and dynamical stability. A method due to Lagrange formalism as applied to thermodynamics of irreversible processes. w: J.F. Besseling, W. Eckaus, redaktorzy, *Trends in applications of mathematics to mechanics*, strony 297–320. Springer-Verlag, Berlin, 1988.
- [19] K.H. Anthony. Unification of the continuum mechanics and thermodynamics by means of Lagrange formalism. Present status of the theory and presumable applications. *Arch. Mech.*, 41:4, 1989. Praca prezentowana podczas 4-ego Polsko-Niemieckiego Sympozjum *Mechanika Niesprężystych Ciał i Struktur*, Mogilany, wrzesień 1987.
- [20] K.H. Anthony, H. Knoppe. Phenomenological thermodynamics of irreversible processes and Lagrange formalism. w: T. Ruggieri, I. Müller, redaktorzy, *Kinetic Theory and Extended Thermodynamics*, Bologna, 1987.
- [21] A. Aziri. *Thermodynamik und Quantenfeldtheorie. Ein quantenfeldtheoretischer Modell der Wärmeleitung*. Universität-Gesamthochschule-Paderborn, 1993. *Praca magisterska*.
- [22] M.P. Bahturin. Preobrazovanije obemnoj akustitcheskoj wolny w wolnu Gualjeva-Blushtejna w sisteme dwuh piezoelektrikow, razdelennyh stchelju. *Akusticheskij zurnal*, XXXV(6):990–995, 1989. (ros.).
- [23] F. Bampi, A. Morro. The inverse problem of the calculus of variations applied to continuum physics. *J. Math. Phys.*, 23:2312–2321, 1982.

- [24] F. Bampi, A. Morro. The connection between variational principles in Eulerian and Lagrangian descriptions. *J. Math. Phys.*, 25(8), 1984.
- [25] D.M. Barnett, J. Lothe. Dislocations and line charges in anisotropic piezoelectric insulators. *Phys. Stat. Sol. (b)*, 67:105–111, 1975.
- [26] D.M. Barnett, J. Lothe. Free surface (Rayleigh) waves in anisotropic half-spaces: the surface impedance method. *Proc. Roy. Soc. London*, 402:135–152, 1985.
- [27] D.M. Barnett, J. Lothe, S.D. Gavazza, J.P. Musgrave. Considerations of the existence of interfacial (Stoneley) wave in bonded anisotropic elastic half-spaces. *Proc. R. Soc. London*, A 402:153–166, 1985.
- [28] B.N. Belintzev. Dissipativnye struktury i problema biologičeskovo formoobrazovanija. *Usp. Fiz. Nauk*, 141:55–101, 1983.
- [29] V.L. Berdichevski. *Variational Principles of the Continuum Mechanics*. Nauka, Moscow, 1983. (ros.).
- [30] H.L. Bertoni, T. Tamir. Unified theory of Rayleigh-angle phenomena for acoustic beams at liquid-solid interfaces. *Appl. Phys.*, 2:157–172, 1973.
- [31] J. Bihl, H. Mehrer, K. Maier. A comparison between microstructuring studies of low-temperature self-diffusion in silver. *Phys. Stat. Sol. (a)*, 50:171, 1978.
- [32] A. Bloch, P.S. Krishnaprasad, J.E. Marsder, T.S. Ratiu. The Euler-Poincaré equations and double bracket dissipation. *Commun. Math. Phys.*, 175:1–42, 1996.
- [33] B.C. Bockstein. *Atoms wander in crystal*. Nauka, Moscow, 1984. (ros.).
- [34] L.M. Brekhovskih. *Waves in layered media*. Academic Press, New York, 1980.
- [35] R.W. Brocket. The double bracket equation as a solution of a variational problem. *Fields Institute Comm.*, 3:69–76, 1994.
- [36] A. Brokowski. Remarks upon the lateral displacement at Rayleigh and Lamb angle. Z. Pawłowski, J.K. Zieniuk, redaktorzy, *Proceedings of the Second Congress of the Federation of Acoustical Societies of Europe FASE-78*, wolumen I, strony 235–239, Warszawa, 18-22 September 1978.
- [37] H. Bross. Der Einfluß von Fehlstellen auf die Gitterwärmeleitfähigkeit bei tiefen Temperaturen. *Phys. Stat. Sol. (b)*, 2:481, 1962.
- [38] S. Chandrasekhar. *Liquid crystals*. Cambridge University Press, 1977.
- [39] E. Cosserat, F. Cosserat. *Théorie des corps déformable*. Hermann, Paris, 1909.
- [40] A.N. Darinskij. Rezonanasnyje javlenija pri otrazenii uprugoj volny na granice geksgonalnyj kristal – anizotropnaja plenka. *ZETF*, 107(2):585–598, 1995.

- [41] P.G. de Gennes. *The physics of liquid crystals*. Oxford University Press, wydanie II, 1993.
- [42] D. Djukic, B. Vujanovic. On a new variational principle of Hamiltonian type for classical field theory. *ZAMM*, 51:611–616, 1971.
- [43] W. Ebeling. *Strukturbildung bei Irreversiblen Prozessen*. Teuber Verlag, Leipzig, 1976.
- [44] A.C. Eringen. Continuum theory of nematic liquid crystals subject to electromagnetic fields. *J. Math. Phys.*, 20:2671–2681, 1979.
- [45] A.C. Eringen. *Microcontinuum field theories I. Foundations of solids*. Springer Verlag, New York, 1999.
- [46] A.C. Eringen, C.B. Kafadar. Polar field theories. A. Cemal Eringen, redaktor, *Continuum Physics, vol. 4*, strony 1–73, New York, 1976. Academic Press.
- [47] A.C. Eringen, G.A. Maugin. *Electrodynamics of continua*, wolumen I. Springer Verlag, New York, 1990.
- [48] A.C. Eringen, G.A. Maugin. *Electrodynamics of continua*, wolumen II. Springer Verlag, New York, 1990.
- [49] J.D. Eshelby, W.T. Read, W. Shockley. Anisotropic elasticity with applications to dislocation theory. *Acta Met.*, 1:251–259, 1953.
- [50] F.I. Fedorov. *Theory of elastic waves in crystals*. Plenum Press, 1968.
- [51] C.P. Flynn. *Point defects and diffusion*. Clarendon Press, Oxford, 1972.
- [52] W.M. Franklin, A.S. Nowick, J.J. Burton (Eds.). *Diffusion in solids*. Academic Press, New York, 1975.
- [53] G.C. Ghirardi, C. Omero, A. Rimini, T. Weber. The stochastic interpretation of quantum mechanics: a critical review. *La Rivista del Nuovo Cimento*, 3:1–30, 1978.
- [54] I.L. Girhman, A.W. Skorkhod. *Stohastitcheskoe differentsialnyje uravnenija*. Naukova Dumka, Kiev, 1968. (ros.).
- [55] P. Glansdorf, I. Prigogine. On a general evolution criterion in macroscopic physics. *Physica*, 30:351–374, 1964.
- [56] P. Glansdorf, I. Prigogine. Non-equilibrium stability theory. *Physica*, 46:344–366, 1970.
- [57] P. Glansdorf, I. Prigogine. *Thermodynamic theory of structure, stability and fluctuations*. Wiley, London, 1971.
- [58] M. Grmela. Bracket formulation of dissipative fluid mechanics equations. *Phys. Lett. A*, 102:355–358, 1984.
- [59] R.A. Grot. Relativistic continuum theory for the interaction of electromagnetic fields with deformable bodies. *J. Math. Phys.*, 11(1):109–113, 1970.

- [60] R.A. Grot. Relativistic continuum physics: electromagnetic interactions. A. Cemal Eringen, redaktor, *Continuum Physics, vol. 3*, strony 130–219, New York, 1976. Academic Press.
- [61] I.D.C. Guerny. Praca doktorska, University of Cambridge, 1957.
- [62] K. Gumiński. *Termodynamika procesów nieodwracalnych*. PWN, Warszawa, 1983.
- [63] H. Haken. *Synergetics*. Springer Verlag, Berlin, 1978.
- [64] H.G.E. Hentschel. The structure and fractal dimension of generalized diffusion-limited aggregates. w: F. Family, D.P. Landau, redaktorzy, *Kinetics of aggregation and gelation, Proceedings of the International Topical Conference on Kinetics of Aggregation and Gelation, April 2-4, 1984, Athens, Georgia, USA*, strony 165–168, Amsterdam, 1984. North-Holland.
- [65] V.L. Indenbom, V.I. Alshits. Dislocations in anisotropic media and Randon's transformation. *Phys. Stat. Sol. (b)*, 63:K125, 1974.
- [66] R.S. Ingarden, A. Jamiołkowski. *Classical electrodynamics*. Elsevier-PWN, Amsterdam, Warszawa, 1985.
- [67] K.A. Ingebrigsten, A. Tønning. Elastic surface waves in crystals. *Phys. Rev.*, 184:942–951, 1969.
- [68] L.V. Johansen. Rezonansnaja difrakcija voln v sloisto-neodnorodnyh sredah. *JETF*, 40(6):1838-1843, 1961. (ros.).
- [69] L.V. Johansen. Teorija rezonansnyh elektromagnitnyh sistem s polnym vnutrennym otrazhenijem. *JTF*, 32(4):406–418, 1962. (ros.).
- [70] S. Kaliski, redaktor. *Drgania i fale*, wolumen III serii *Komitet Mechaniki PAN, Mechanika techniczna*. PWN, Warszawa, 1986.
- [71] A.N. Kaufman. Dissipative Hamiltonian systems: a unifying principle. *Physics Letters A*, 100:419–422, 1984.
- [72] J.L. Klimontovitch. *Statisticheskaja fizika*. Nauka, Moscow, 1982. (ros.).
- [73] W. Kosiński. Równania ewolucji ciał dyssypatywnych. *Prace IPPT* 36/1983, Warszawa.
- [74] E. Kossecka. Theory of dislocation lines in a continuous medium. *Arch. Mech.*, 21:167, 1969.
- [75] R. Kotowski. On the Lagrange functional for dissipative processes. *Arch. Mech.*, 41(4):571–587, 1989.
- [76] R. Kotowski. Hamilton's principle in thermodynamics. *Arch. Mech.*, 44(2):203–215, 1992.
- [77] R. Kotowski. Lagrangian for thermoelasticity. w: K.H. Anthony, redaktor, *Proc. 7th Intl. Symp. on Continuum Models in Discrete Systems*, strony 31–38, Paderborn, 1992. Materials Science Forum, Vol. 123-125.
- [78] R. Kotowski. Canonical formalism for dissipative processes. w: R. Kotow-

- ski, A. Radowicz, redaktorzy, *Proceedings of the Workshop Dissipation in Physical Systems – Unifying Approaches*, wolumen 59 serii *Mechanika*, strony 65–76, Borków, Poland, 3-5, April 1995. Wydawnictwo Politechniki Świętokrzyskiej, seria *Mechanika*, Kielce.
- [79] R. Kotowski, J. Hołyst. Hamiltonians for dissipative processes. *Periodica Polytechnica, ser. Physics and Nuclear Sci.*, 2(1-2):29–40, 1994.
- [80] R. Kotowski, A. Radowicz, redaktorzy. *Proceedings of the Workshop Dissipation in Physical Systems – Unifying Approaches*, wolumen 59 serii *Mechanika*, Borków, Poland, 3-5, April 1995. Wydawnictwo Politechniki Świętokrzyskiej, Kielce.
- [81] R. Kotowski, E. Radzikowska. Variational principle in thermo - electro - magneto - dynamics of micropolar media. *J. Techn. Phys.*, 39(2):283–295, 1998.
- [82] R. Kotowski, E. Radzikowska. Variational approach to the thermo - electrodynamics of liquid crystals. *Int. J. Engng Sci.*, 37:771–802, 1999.
- [83] R. Kotowski, E. Radzikowska. Evolution criterion in the coupled fields theory. *Technische Mechanik*, 22(2):141–151, 2002.
- [84] R. Kotowski, Cz. Rymarz. *Modelowanie ośrodków mikrostrukturalnych*. Instytut Naukowo-Badawczy ZTUREK, 2004.
- [85] R. Kotowski, A. Trzęsowski, K.-H. Anthony. On non-classical diffusion theories. w: G.A. Maugin, redaktor, *Proc. 6th Symp. on Continuum Models and Discrete Systems (CMDS 6)*, strony 253–262, Dijon, France, 1989 1991. Longman Scientific & Technical.
- [86] J. Kutzner. Zur Bündelversetzung bei der Reflexion von transversalen Ultraschallwellen an freien Grenzflächen. *Acustica*, 45(1):25–29, 1980.
- [87] C. Lanczos. *The variational principles of mechanics*. University of Toronto Press, Toronto, 1970.
- [88] G. Lebon. Variational principles in thermodynamics. G. Lebon, P.Perzyna, redaktorzy, *Recent developments in thermodynamics of solids*, CISM Courses and Lectures No 262, Udine, Italy, strony 221–415. Springer-Verlag, 1980.
- [89] F.M. Leslie. Some constitutive equations for liquid crystals. *ARMA*, 28:265–283, 1968.
- [90] E. Lothe, V.I. Alshits. O kriterii suschestvovaniya kvaziobjemnyh povierhnostnyh voln. *Kristallografija*, 22(5):906–916, 1977. (ros.).
- [91] J. Lothe. Theory of dislocation mobility in pure slip. *J. Appl. Phys.*, 33:2116, 1962.
- [92] J. Lothe, D.M. Barnett. On the existence of surface-wave solutions for

- anisotropic half-spaces with free surface. *J. Appl. Phys.*, 47:428–433, 1976.
- [93] K. Maier, H. Mehrer, G. Rein. Self-diffusion in molybdenum. *Zeitschrift für Metallkunde*, 70:271–276, 1979.
- [94] I. Malecki. *Teoria fal i układów akustycznych*. PWN, Warszawa, 1964.
- [95] K. Malén, J. Lothe. Comment on dislocations moving with Rayleigh wave velocity. *phys. stat. sol. (b)*, 43:K139–K142, 1971.
- [96] E.G. Maximov, O.A. Pankratov. Vodorod v metallah. *Usp.Fiz.Nauk*, 116:385–412, 1975.
- [97] B. Mielnik, T. Tengstrand. Nelson-Brown motion: some question marks. *Int.J.Theor.Phys.*, 19:239, 1983.
- [98] P.M. Morse, H. Feschbach. *Methods of theoretical physics*, wolumen 1 and 2. McGraw Hill, New York, 1953.
- [99] S. Mrowec. *Teoria dyfuzji w stanie statym*. PWN, 1989.
- [100] W. Muschik. Fundamentals of nonequilibrium thermodynamics. w: W. Muschik, redaktor, *Non-equilibrium thermodynamics with applications to solids*, CISM Courses and Lectures No 336, Udine, Italy, strony 1–63. Springer-Verlag, 1993.
- [101] W. Muschik, C. Papenfuss. An evolution criterion of nonequilibrium thermodynamics and its application to liquid crystals. *Physica A*, 201:515–526, 1993.
- [102] W. Muschik, R. Trostel. Variational principles in thermodynamics (Survey). *ZAMM*, 63:T190–T192, 1983. GAMM-Tagung 1982.
- [103] M.J.P. Musgrave. *Crystal acoustics*. Holden-Day-Cambridge, 1970.
- [104] L. Natanson. On the laws of irreversible phenomena. *Phil. Mag.*, 41(252):385–406, 1896.
- [105] A.H. Nayfeh, D.E. Chimenti. Ultrasonic wave reflection from liquid-coupled orthotropic plates with application to fibrous composites. *J. Appl. Mech.*, 55:683–870, 1988.
- [106] E. Nelson. Derivation of the Schrödinger equation from Newtonian mechanics. *Phys. Rev.*, 150:1079–1088, 1966.
- [107] E. Nelson. *Dynamical theories of Brownian motion*. Princeton University Press, Princeton, New Jersey, 1967.
- [108] W.G. Neubauer. Ultrasonic reflection of a bounded beam at Rayleigh and critical angles for a plane - solid interface. *J. Appl. Phys.*, 44(1):48–55, 1973.
- [109] T.D. Ngoc, W.G. Mayer. Ultrasonic nonspecular reflectivity near longitudinal critical angle. *J. Appl. Phys.*, 50(12):7948–7951, 1979.
- [110] T.D. Ngoc, W.G. Mayer. Influence of plate mode structure and Gaussian

- beam profile characteristics on ultrasonic reflection and transmission. *IE-EE Trans. Son. Ultrason.*, SU-29:112–114, 1982.
- [111] M. Nishioka. Role of certain gradient vector fields in quantum mechanics. *Il Nuovo Cimento*, 77B:19–30, 1983.
- [112] W. Noll. A mathematical theory of the mechanical behaviour of continuous media. *ARMA*, 2:197, 1958.
- [113] A.N. Norris. Back reflection of ultrasonic waves from a liquid-solid interface. *J. Acoust. Soc. Amer.*, 73(2):427–434, 1983.
- [114] A.N. Norris. The influence of beam type on the back reflection of ultrasonic beams from a liquid-solid interface. *J. Acoust. Soc. Amer.*, 76(2):629–631, 1984.
- [115] C. Papenfuss, W. Muschik. Evolution criterion in nonequilibrium and a variational principle for equilibrium states of free-standing liquid crystal films. *Physical Review E*, 56(4):4275–4281, 1997.
- [116] P. Perzyna. Thermodynamics of dissipative materials. w: G. Lebon, P. Perzyna, redaktorzy, *Recent developments in thermodynamics of solids*, CISM Courses and Lectures No 262, strony 95–220. Springer-Verlag, Udine, Italy, 1980.
- [117] J. Pott, J.G. Harris. Scattering of an acoustic Gaussian beam from a fluid-solid interface. *J. Acoust. Soc. Amer.*, 76(6):1829–1838, 1984.
- [118] A. Radowicz. *Procesy dyssypacji w sprężystym ferromagnetyku*. Number 9 serii Mechanika. Politechnika Świętokrzyska, Kielce, 1998.
- [119] E. Radzikowska. Variational approach to the interactions of electromagnetic fields with nematic liquid crystals. I. Reversible processes. *Bull. Pol. Ac. Sci., Tech. Sci.*, 32(5-6):235–243, 1984.
- [120] E. Radzikowska. Variational approach to the interactions of electromagnetic fields with nematic liquid crystals. II. Irreversible processes. *Bull. Pol. Ac. Sci., Tech. Sci.*, 32(5-6):245–247, 1984.
- [121] E. Radzikowska, R. Kotowski, W. Muschik. Evolution criterion for electromagnetic bodies. *J. Non-Equilib. Thermodyn.*, 26(3):215–250, 2001.
- [122] F. Reif. *Statistical physics*. McGraw-Hill, New York, 1965.
- [123] H. Rund. *The Hamilton-Jacobi theory in the calculus of variations*. D. van Nostrand Comp., London, 1966.
- [124] Cz. Rymarz. *Mechanika ośrodków ciągłych*. PWN, 1993.
- [125] R.M. Santilli. Necessary and sufficient conditions for the existence of a Lagrangian in field theory. I. Variational approach to self-adjointes for tensorial field equations. *Annals of Physics*, 103:354–408, 1977.
- [126] R.M. Santilli. Necessary and sufficient conditions for the existence of a

- Lagrangian in field theory. II. Direct analytic representations of tensorial field equations. *Annals of Physics*, 103:409–468, 1977.
- [127] R.M. Santilli. Necessary and sufficient conditions for the existence of a Lagrangian in field theory. III. Generalized analytic representation of tensorial field equations. *Annals of Physics*, 105:227–258, 1977.
- [128] R.M. Santilli. *Foundations of theoretical mechanics I. The inverse problem in Newtonian mechanics*. Springer-Verlag, 1978.
- [129] R.M. Santilli. *Foundations of theoretical mechanics II. Birkhoffian generalization of Hamiltonian mechanics*. Springer-Verlag, 1983.
- [130] A. Schoch. Schallreflexion, Schallbrechung und Schallbeugung. *Ergeb. Exact. Naturwiss.*, 23:127, 1950.
- [131] M. Scholle. *Hydrodynamik im Lagrangeformalismus: Untersuchungen zur Wärmeleitung in idealen Flüssigkeiten*. Universität–Gesamthochschule Paderborn, 1994. *Praca magisterska*.
- [132] L.T. Sedov. Matematicheskie metody novih modelej kontinualnyh sred. *Usp. Math. Nauk*, 20(5):121–180, 1965. (ros.).
- [133] A. Seeger. Die experimentelle Ermittlung der elastischen Konstanten höherer Ordnung. *Z.Naturforsch.*, 15a:1056, 1960.
- [134] F. Sidoroff. On the formulation of plasticity and viscoplasticity with internal variables. *Archives of Mechanics*, 5-6:807–819, 1975.
- [135] S. Sieniutycz. *Conservation laws in variational thermo-hydrromechanics*. Kluwer Academic Publishers, 1994.
- [136] A.A. Smirnov. *Teorija diffuzi v splavach s vnudriennymi atomami*. Naukova Dumka, Kiev, 1982. (ros.).
- [137] J.J. Stammes. Role of background waves in backscattering of ultrasonic beams at a liquid-solid interface. *J. Acoust. Soc. Amer.*, 76(2):627–628, 1984.
- [138] A.D. Stepunovitch, W.A. Ulitzkij. *Lekcii po statisticheskoj fizike*. Wytshchaja Schkoua, Moskva, 1978. (ros.).
- [139] A.N. Stroh. Steady state problems in anisotropic elasticity. *J. Math. Phys.*, 41:77–103, 1962.
- [140] T. Tamir, H.D. Bertoni. Lateral displacement of optical beams at multilayered and periodic structures. *J. Opt. Soc. Amer.*, 61:1397, 1971.
- [141] K. Tatarkiewicz. *Rachunek wariacyjny*, wolumen I. WNT, Warszawa, 1969.
- [142] T.C.T. Ting. *Anisotropic elasticity. Theory and applications*. Oxford University Press, New York, 1966.
- [143] C. Truesdell. *Rational thermodynamics*. McGraw-Hill, New York, 1969.

- [144] A. Trzęsowski, R. Kotowski. Nonlinear diffusion and Nelson-Brown movement. *Int. J. Theor. Phys.*, 24(6):533–556, 1985.
- [145] A. Trzęsowski, R. Kotowski. Nonlinear diffusion and Schrödinger equation. A.J.M. Spencer, redaktor, *Proc. 5th Intl. Symp. on Continuum Models of Discrete Systems*, strony 145–150, Nottingham, 1992. A.A. Balkema, 1987.
- [146] A. Trzęsowski, S. Piekarski. Markovian description of irreversible processes and the randomization. *Il Nuovo Cimento*, 14(8):767–787, 1992.
- [147] T. Tsukamoto. Step parameter ΔE in random walk model of dissipative heavy ion collisions. *Progress in Theoretical Physics*, 68(2):580–588, 1982.
- [148] L.A. Turski. Diffusion. *Arch. Mech.*, 50:629–644, 1998.
- [149] I.A. Victorov. *Rayleigh and Lamb waves: physical theory and applications*. Plenum Press, New York, 1967.
- [150] I.A. Victorov. *Poverhnostnye zvukovye volny v tvjordih telah*. Nauka, Moskva, 1981. (ros.).
- [151] B. Vujanovic, D. Djukic. On one variational principle of Hamilton's type for nonlinear heat transfer problem. *Intern. J. Heat and Mass Trans.*, 15:1111–1123, 1972.
- [152] P. Weiss. On the Hamilton–Jacobi Theory and Quantization of Generalized Electrodynamics. *Proc. Roy. Soc. (London)*, A169:119–133, 1939.
- [153] Z. Wesołowski. *Akustyka ciała sprężystego*. PWN, Warszawa, 1989.
- [154] K. Wilmanski. Foundations of thermoelasticity. G. Lebon, P. Perzyna, redaktorzy, *Recent developments in thermodynamics of solids*, CISM Courses and Lectures No 262, strony 1–94. Springer-Verlag, Udine, Italy, 1980.
- [155] K. Yasue. Quantum mechanics of nonconservative systems. *Annals of Physics*, 114:479–496, 1978.